

30<sup>PM</sup>

a619345

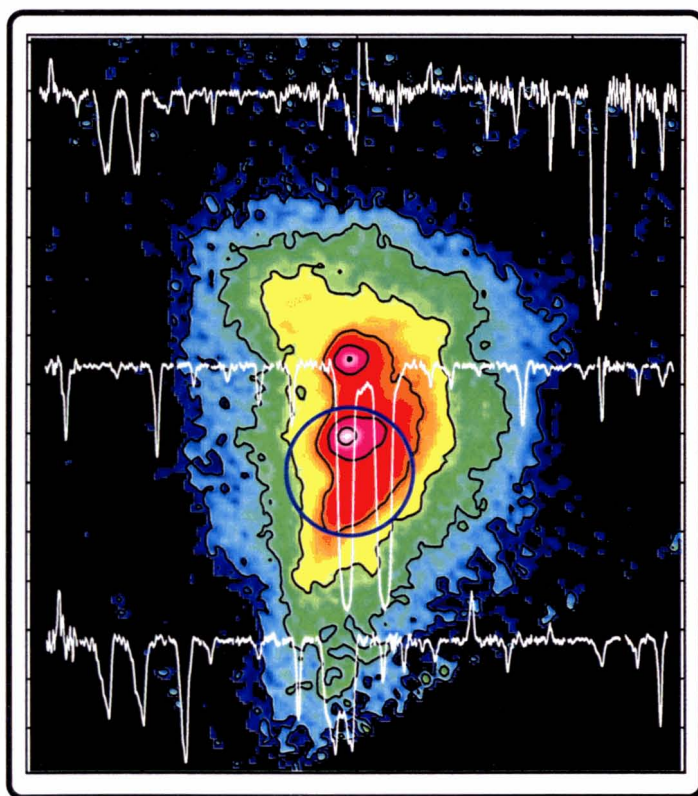
C/2590

Fe

# Astrofísica Molecular en el Infrarrojo lejano: NUBES INTERESTELARES Y CIRCUNESTELARES

---

Universidad Autónoma de Madrid  
Facultad de Ciencias  
Departamento de Física Teórica



Consejo Superior de Investigaciones Científicas  
Instituto de Estructura de la Materia  
Departamento de Astrofísica Molecular e Infrarroja

Reg. F. C. 32.382



**Javier Rodríguez Goicoechea**

Astrofísica Molecular en el Infrarrojo lejano:  
NUBES INTERESTELARES Y CIRCUNESTELARES

Javier Rodríguez Goicoechea



# Astrofísica Molecular en el Infrarrojo lejano: NUBES INTERESTELARES Y CIRCUNESTELARES

TESIS DOCTORAL realizada por:

**Javier Rodríguez Goicoechea**

DIRECTOR:

**José Cernicharo Quintanilla**

Departamento de Física Teórica  
Facultad de Ciencias  
Universidad Autónoma de Madrid

Consejo Superior de Investigaciones Científicas  
Instituto de Estructura de la Materia  
Departamento de Astrofísica Molecular e Infrarroja

©2003 - Javier Rodríguez Goicoechea  
Imagen portada: Emisión de Sgr B2 a  $350\ \mu\text{m}$  (Dowell et al.)  
y espectro ISO/LWS-Fabry-Perot de Sgr B2 entre 43 y  $197\ \mu\text{m}$ .

Director: Dr. José Cernicharo Quintanilla (CSIC)  
Tutor: Dr. Carlos Eiroa de San Francisco (UAM)



# Prefacio

Debido a la opacidad atmosférica, el dominio IR-lejano del espectro electromagnético ha sido la última ventana en ser utilizada por la *Astrofísica Molecular*. El potencial que supone abrir este nuevo rango de frecuencias a través de la *espectroscopia molecular* ha comenzado a ser explotado con el *Infrared Space Observatory (ISO)*. La sensibilidad de la instrumentación embarcada en dicho satélite no tiene comparación alguna con las escasas misiones espaciales, o a bordo de aviones, realizadas con anterioridad a su lanzamiento. En particular, casi todo el rango operativo de **ISO** en el IR-lejano no había sido explorado. El espectro IR-lejano de las fuentes más representativas de la galaxia era desconocido, y en particular los principales emisores de radiación, las moléculas, estaban por identificar. Las observaciones en el IR-lejano están especialmente indicadas para el estudio del *gas caliente* en las nubes moleculares del medio interestelar y en el interior de las envolturas circunestelares alrededor de estrellas evolucionadas. Algunas de estas fuentes; *Sgr B2* en el Centro Galáctico y las *Proto-Nebulosas Planetarias*, constituyen uno de los objetos más paradigmáticos en nuestra comprensión de la *complejidad química* de la Galaxia. Muchas de las especies moleculares que pueden ser detectadas en el IR-lejano son esenciales para el estudio de las condiciones físicas y químicas del medio interestelar y circunestelar. La abundancia del *vapor de agua*, por ejemplo, puede determinar si se formarán estrellas durante el colapso gravitatorio de una nube molecular. Otro ejemplo son las *cadenas lineales ricas en carbono*, que pueden ser los “*esqueletos*” a partir de los cuales se formen las grandes moléculas carbonadas responsables de buena parte de la emisión IR de la Galaxia ...

# Preface

Due to the atmospheric opacity, the far-IR domain has been the last window used by *Molecular Astrophysics*. The potential of opening a new spectral frequency range through *molecular spectroscopy* has just begun to be exploited with the *Infrared Space Observatory (ISO)*. The sensitivity of the instrumentation on board this satellite has no comparison with the few previous space missions or airborne observations carried before the launch of **ISO**. Almost all the operative range of **ISO** in the far-IR was not explored before. The far-IR spectrum of the most significant galactic sources was unknown. In particular, the main radiation emitters, the molecules, were unidentified. Far-IR observations are specially suited to the study of the *warm gas* in both, the molecular clouds in the interstellar medium and the inner regions of the circumstellar envelopes around evolved stars. Some of these sources: *Sgr B2* in the Galactic Center and the Proto-Planetary Nebulae, are paradigmatic objects for our knowledge of the *chemical complexity* of the Galaxy. Some of the molecular species that can be detected in the far-IR domain are essential for the study of the physical and chemical conditions of the interstellar and circumstellar media. As a example, the water vapor abundance can determine if stars will be formed during the gravitational collapse of a molecular cloud. Another example are the linear carbon chains. These species can be the “*skeletons*” from which the large carbon molecules responsible of a great part of the IR emission in the Galaxy can be formed ...

*Dedicado a mis Padres y a Ana*

# Agradecimientos

*El estudio aquí presentado resume el trabajo de casi 4 años y ha requerido una gran cantidad de esfuerzo y dedicación personal. Sin embargo, habría sido imposible sin la colaboración y apoyo de muchas personas que están o estuvieron en el Instituto de Estructura de la Materia (IEM) del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC).*

*Me gustaría agradecer al Prof. José Cernicharo (Pepe) la dirección científica y mi formación en el campo de la Astrofísica Molecular. También le agradezco la libertad y confianza que ha depositado en mi. Su energía y pasión por la búsqueda de nuevas moléculas y por la química del medio interestelar y circunestelar, son una gran fuente de motivación para mi.*

*A Fabrice Herpin, con el que he realizado parte del trabajo sobre estrellas evolucionadas y compartido algunas tardes maravillosas de buen fútbol antes de que regresara a Burdeos; a Paco Najarro, verdadero “brujo” de la informática, por su paciencia y generosidad para lidiar con estos malditos ordenadores; a Juan Ramón Pardo, por el tiempo que ha dedicado en algunas de las observaciones que se presentan en esta tesis y porque Fuentalbilla, tiene que ser el paraíso; a Chusa Sempere, porque siempre me ha ayudado y me ha aconsejado en los buenos y no tan buenos momentos; a David Fosse, con el que tantas veces he hablado de nuestro futuro en la Astronomía; a Eduardo Gonzalez, dispuesto a resolver cualquier duda con sus buenas explicaciones; a Asun, tantas veces mi mentora; y a Nemesio Rodríguez Fernández, colaborador en la última parte de la tesis, por mostrarme los misterios del gas ionizado.*

*En el último año, se han unido varias personas que han contribuido a la creación del Departamento de Astrofísica Molecular e Infrarroja: Al Prof. Jesus Martín Pintado le agradezco el trato personal y su motivación para que siga en la investigación; a Arturo Rodríguez Franco, por introducirme en el mundo de la Zarzuela y del japonés; y a los demás, sobre todo a los nuevos becarios (Izaskun, Pablo, Miguel,...) les agradezco el clima y el buen rollo, y les animo a trabajar duro, que no es incompatible con divertirse en la vida ...*

*También agradezco a la Universidad Autónoma de Madrid y al CSIC por financiar parcialmente este trabajo. En particular doy las gracias al Servicio de Investigación de la UAM y a mi tutor, Carlos Eiroa por algún quebradero de cabeza que les di.*

*Finalmente, agradezco a todo el personal del Instituto de Estructura de la Materia (IEM/CSIC) que de forma indirecta han contribuido a que mi trabajo haya sido posible.*

*A mi familia le agradezco su cariño y apoyo infinito. A Ana le doy las gracias por estar siempre a mi lado, por soportar mis horarios y por el maravilloso camino que recorreremos juntos. A mis amigos de siempre, a los nuevos, a todos. Gracias.*

Javier Rodríguez Goicoechea  
Madrid, Junio del 2003

# Índice de Materias

Portada . . . . .	i
Prefacio . . . . .	1
Dedicatoria . . . . .	3
Agradecimientos . . . . .	5
Índice de Materias . . . . .	7
Acrónimos . . . . .	9
<b>1 Introducción</b>	<b>11</b>
1.1 LAS MOLÉCULAS EN EL ESPACIO . . . . .	11
1.2 ASTRONOMÍA ESPACIAL EN EL IR-LEJANO . . . . .	14
1.3 EL TELESCOPIO ESPACIAL ISO . . . . .	15
1.4 OBJETIVOS Y ESTRUCTURA DE LA TESIS . . . . .	16
<b>2 Transferencia de radiación en líneas moleculares</b>	<b>19</b>
2.1 TRANSFERENCIA DE RADIACIÓN . . . . .	19
2.2 GEOMETRÍA ESFÉRICA . . . . .	27
2.3 LA APROXIMACIÓN LVG . . . . .	29
2.4 MODELOS NO-LOCALES . . . . .	32
<b>PARTE I. NUBES INTERESTELARES</b>	<b>39</b>
<b>3 El Centro Galáctico y Sgr B2</b>	<b>41</b>
3.1 CARACTERÍSTICAS del CENTRO GALÁCTICO . . . . .	41
3.2 LA REGIÓN DE SGR B2 . . . . .	50
3.3 RESUMEN . . . . .	65
<b>4 Espectroscopia molecular en la envoltura de Sgr B2(M)</b>	<b>67</b>
4.1 EL ESPECTRO ISO/LWS DE SGR B2(M) . . . . .	67
4.2 LA EMISIÓN DEL POLVO . . . . .	73
4.3 DETECCIÓN DE $\text{H}_3\text{O}^+$ : LA QUÍMICA DEL OXÍGENO . . . . .	77
4.4 EL VAPOR DE AGUA: ¿LA ENVOLTURA CALIENTE? . . . . .	84
4.5 EMISIÓN FLUORESCENTE DE OH . . . . .	96
4.6 DETECCIÓN DE $\text{C}_3$ EN EL ISM . . . . .	104
4.7 RESUMEN . . . . .	110

<b>5 La región extensa de Sgr B2</b>	<b>113</b>
5.1 INTRODUCCIÓN . . . . .	113
5.2 OBSERVACIONES . . . . .	115
5.3 LA EMISIÓN EXTENSA DEL POLVO . . . . .	118
5.4 LÍNEAS DE ESTRUCTURA FINA . . . . .	120
5.5 EL GAS MOLECULAR . . . . .	131
5.6 VISIÓN GLOBAL DE LA REGIÓN DE SGR B2 . . . . .	142
5.7 RESUMEN . . . . .	143
<b>PARTE II. ENVOLTURAS CIRCUNESTELARES</b>	<b>145</b>
<b>6 Las proto-Nebulosas Planetarias</b>	<b>147</b>
6.1 EVOLUCIÓN DE ESTRELLAS DE MASA INTERMEDIA . . . . .	148
6.2 CSEs DE LAS ESTRELLAS AGB . . . . .	149
6.3 EVOLUCIÓN post-AGB . . . . .	151
6.4 PROPIEDADES DE LAS PPNeS . . . . .	153
<b>7 Evolución Química de PPNeS carbonadas</b>	<b>157</b>
7.1 INTRODUCCIÓN . . . . .	157
7.2 OBSERVACIONES Y ANÁLISIS DE LOS DATOS . . . . .	159
7.3 REPRESENTATIVIDAD DE LA MUESTRA . . . . .	161
7.4 IRC+10216: PROTOTIPO DE AGB CARBONADA . . . . .	162
7.5 CRL 2688: UNA PPNe JOVEN . . . . .	163
7.6 CRL 618: UNA PPNe . . . . .	171
7.7 NGC 7027: UNA PNe JOVEN . . . . .	183
7.8 DISCUSIÓN GLOBAL . . . . .	186
7.9 CONCLUSIONES . . . . .	188
<b>8 Nuevas Bandas Moleculares en el Infrarrojo Lejano</b>	<b>191</b>
8.1 LAS CADENAS LINEALES DE CARBONO $C_n$ . . . . .	191
8.2 DETECCIÓN DE $C_3$ EN IRC+10216 . . . . .	194
8.3 PRIMERA DETECCIÓN TENTATIVA DE $C_4$ . . . . .	197
8.4 RESUMEN . . . . .	203
<b>9 Resumen, conclusiones y perspectivas</b>	<b>205</b>
<b>A Modelos de OH en Sgr B2</b>	<b>215</b>
A.1 MODELOS NO-LOCALES DE OH . . . . .	215
<b>Publicaciones</b>	<b>225</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>227</b>
<b>Figuras y Tablas</b>	<b>237</b>
Lista de Figuras . . . . .	237
Lista de Tablas . . . . .	239

# Acrónimos

AGB	<i>Asymptotic Giant Branch</i>
ALMA	<i>Atacama Large Millimeter Array</i>
AOT	<i>Astronomical Observation Template</i>
CG	<i>Centro Galáctico</i>
COBE	<i>Cosmic Background Explorer</i>
CSE	<i>Circumstellar Envelope</i>
CSO	<i>Caltech Submillimeter Observatory</i>
DG	<i>Disco Galáctico</i>
ETL	<i>Equilibrio Termodinámico Local</i>
ETR	<i>Ecuación de Transferencia de Radiación</i>
FP	<i>Fabry-Perot</i>
FWHM	<i>Full Width at Half Maximum</i>
HSO	<i>Herschel Space Observatory</i>
HST	<i>Hubble Space Telescope</i>
IAU	<i>International Astronomical Union</i>
IDA	<i>ISO Data Archive</i>
IR	<i>InfraRojo</i>
IRAM	<i>Institut de Radio-Astronomie Millimétrique</i>
IRAS	<i>Infrared Astronomical Satellite</i>
ISAP	<i>ISO Spectral Analysis Package</i>
ISM	<i>Inter-Stellar Medium</i>
ISO	<i>Infrared Space Observatory</i>
KAO	<i>Kuiper Airborne Observatory</i>
LSR	<i>Local Standard of Rest</i>
LVG	<i>Large Velocity Gradient</i>
NICMOS	<i>Near IR Camara and MultiObject Spectrometer</i>
OLP	<i>Off Line Processing</i>
PDR	<i>Photo-Dissociation Region</i>
PNe	<i>Planetary Nebula</i>
PPNe	<i>Proto- Planetary Nebula</i>
RIL	<i>Resonancia Interna de Lindblad</i>
SP	<i>Secuencia Principal</i>
SWAS	<i>Submillimeter Wave Astronomy Satellite</i>
UV	<i>UltraVioleta</i>
VLA	<i>Very Large Array</i>
XDR	<i>X-ray Dominated Region</i>
ZMC	<i>Zona Molecular Central</i>

# Capítulo 1

## Introducción

A mediados de los años 30 se descubrieron las primeras especies moleculares del espacio. Hasta entonces, la existencia de moléculas en el medio interestelar (ISM) y circunestelar (CSM) era considerada altamente improbable. En una conferencia dada en 1926, Eddington afirmó que “los átomos eran física, mientras que las moléculas eran *sólo* química”. La hoy denominada *Astrofísica Molecular*, constituye una de las ramas más excitantes y prolíferas de la Astronomía. Casi 80 años después, se reconoce que las moléculas en el espacio existen, son abundantes, variadas y están presentes en multitud de escenarios con muy diferentes condiciones físicas. Desde las detecciones más “primitivas” se han descubierto más de 130 especies moleculares diferentes y la lista seguirá aumentando (véase la TABLA 1.2).

Además del interés intrínseco que supone su presencia en el espacio, la información que se puede inferir sobre las condiciones fisicoquímicas de las regiones donde se localizan es difícilmente accesible mediante otras herramientas de la Astronomía.

### 1.1 LAS MOLÉCULAS EN EL ESPACIO

Las primeras moléculas detectadas en el ISM fueron los radicales CH, CH<sup>+</sup> y CN. Las estrechas líneas de absorción que producían en el espectro visible de algunas estrellas fueron correctamente atribuidas a las transiciones electrónicas de estas moléculas producidas en el gas difuso situado entre el observador y la estrella (Dunham 1937; Swings & Rosenfeld 1937). Una de las primeras conclusiones obtenidas fue la bajísima temperatura de las regiones donde se producían las absorciones. Para el caso de CN (McKellar 1941), las implicaciones de este resultado son sorprendentes. A partir de las intensidades producidas por las líneas de CN se dedujo que la temperatura de excitación a la que estaban poblados los niveles rotacionales de la molécula era independiente de la línea de mirada elegida para la observación. Esta temperatura oscilaba alrededor de 3 K en cualquiera de las direcciones. Debido a su elevado momento dipolar eléctrico, las colisiones con otras partículas del gas no contribuyen en la excitación de la molécula y la población de los niveles rotacionales está en equilibrio con la radiación ambiente que baña el gas. Si la intensidad del campo de radiación está dada por una *distribución de Planck*, la temperatura del *cuerpo negro* es igual a la temperatura de excitación de la molécula. El propio Herzberg, premio Nobel de Química en 1971 y padre de la espectroscopia molecular moderna, escribía en los años 50: “obviamente este resultado tiene un significado muy limitado”.



Sólo 25 años después, con el descubrimiento del fondo de radiación cósmica (y su isotropía) por Penzias & Wilson (1965) se comprendió que la temperatura rotacional derivada para las líneas de CN constituía la primera medida de la temperatura del fondo de radiación.

El advenimiento de la radioastronomía en longitudes de onda centimétricas tuvo como primer éxito el descubrimiento en 1951 de la emisión del hidrógeno neutro interestelar, poniendo de manifiesto la importancia de la componente neutra de la galaxia. Después de un periodo de tiempo donde las observaciones ópticas en el visible no desvelaron la presencia de ninguna otra especie molecular, las técnicas radioastronómicas hicieron resurgir en pocos años el campo de la Astrofísica Molecular. En los años 60 se descubrieron OH (Weinreb *et al.* 1963), H<sub>2</sub>O y NH<sub>3</sub> hacia el centro de la galaxia por el grupo de C.H. Townes (1968) y H<sub>2</sub>CO (1969) en distintas regiones de la galaxia. En particular, OH fue la primera molécula detectada fuera de la galaxia (Weliachew 1971). Obviamente en aquella época sólo podían detectarse las moléculas con transiciones en el dominio de frecuencias de los primeros radiotelescopios.

En la primavera de 1970, se descubrió la línea rotacional fundamental del CO en la región milimétrica del espectro por A.A. Penzias y colaboradores, probablemente el diagnóstico molecular más utilizado. Durante esos años la astronomía milimétrica tomó el relevo en la detección de nuevas moléculas, *p.ej.*, CS, HCN, CH<sub>3</sub>OH y HCO<sup>+</sup>. A la vez que se descubrían nuevas especies y las ya conocidas se detectaban en diferentes regiones galácticas y extragalácticas surgían más incógnitas a las que había que ir dando respuesta. ¿Qué mecanismos químicos hacían posible la presencia de moléculas en regiones tan "castigadas" como el medio difuso? ¿Habría más moléculas en el espacio o se trataba sólo de una lista reducida de especies simples? ¿Se podría inferir información sobre las condiciones físicas de las fuentes observadas?.

El desarrollo de la Astrofísica Molecular está directamente relacionado con las observaciones astronómicas, el conocimiento de la teoría física y la espectroscopia molecular, los experimentos en laboratorios terrestres y la sofisticación tecnológica de los detectores y receptores de los telescopios. El avance simultáneo de estas parcelas ha permitido ir respondiendo las cuestiones planteadas en los primeros años de descubrimientos. Sin embargo, la alta complejidad del medio que se estudia y la cantidad y calidad de las observaciones modernas hace que los nuevos interrogantes motiven una intensa investigación. Además, la utilización de las moléculas como diagnóstico en Astronomía proporciona ciertas ventajas sobre otras técnicas tradicionales y ofrece un nexo de unión entre los fenómenos microscópicos y macroscópicos que rigen el comportamiento del ISM y CSM.

Comparada con los átomos, la estructura de los niveles energéticos de las moléculas es mucho más compleja ya que el número de grados de libertad posibles es superior. La determinación de los distintos estados energéticos (espectroscopia) se puede simplificar a través de la *aproximación de Born-Oppenheimer* en la que los movimientos asociados a los electrones y núcleos se tratan independientemente debido a la gran diferencia entre sus masas.

En este contexto existen tres tipos de transiciones cuyas líneas espectrales pueden observarse en tres regiones diferentes del espectro electromagnético: *electrónicas* (UV al visible), *vibracionales* (IR cercano al IR lejano) y *rotacionales* (IR lejano al radio). Para un tipo de transición dada el rango de mayor energía corresponde a las especies ligeras y el de menor a las especies pesadas. La determinación exacta de las longitudes de onda de cada transición depende del número y tipo de átomo (electrones, espín nuclear, etc.) y de la simetría de la molécula. La estructura espectral se hace cada vez más compleja según aumenta el número de átomos porque

TABLA 1.1: *Lista de las moléculas interestelares y circunestelares (hasta 2003).*

<b>Moléculas diatómicas</b> AlF AlCl C <sub>2</sub> CH CH <sup>+</sup> CN CO CO <sup>+</sup> CP CS SiC HCl H <sub>2</sub> KCl NH NO NS NaCl OH PN SO SO <sup>+</sup> SiN SiO SiS HF SH FeO? O <sub>2</sub> ?
<b>Moléculas triatómicas</b> C <sub>3</sub> C <sub>2</sub> H C <sub>2</sub> O C <sub>2</sub> S CH <sub>2</sub> HCN HCO HCO <sup>+</sup> HCS <sup>+</sup> HOC <sup>+</sup> H <sub>2</sub> O H <sub>2</sub> S HNC HNO MgCN MgNC N <sub>2</sub> H <sup>+</sup> N <sub>2</sub> O NaCN OCS SO <sub>2</sub> c-SiC <sub>2</sub> CO <sub>2</sub> NH <sub>2</sub> H <sub>3</sub> <sup>+</sup> SiCN AlNC
<b>Moléculas con cuatro átomos</b> c-C <sub>3</sub> H l-C <sub>3</sub> H C <sub>3</sub> N C <sub>3</sub> O C <sub>3</sub> S C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> D <sup>+</sup> ? HCCN HCNH <sup>+</sup> HNCO HNCS HOCO <sup>+</sup> H <sub>2</sub> CO H <sub>2</sub> CN H <sub>2</sub> CS H <sub>3</sub> O <sup>+</sup> NH <sub>3</sub> SiC <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>
<b>Moléculas con cinco átomos</b> C <sub>5</sub> C <sub>4</sub> H C <sub>4</sub> Si l-C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> c-C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CN CH <sub>4</sub> HC <sub>3</sub> N HC <sub>2</sub> NC HCOOH H <sub>2</sub> CHN H <sub>2</sub> C <sub>2</sub> O H <sub>2</sub> NCN HNC <sub>3</sub> SiH <sub>4</sub> H <sub>2</sub> COH <sup>+</sup>
<b>Moléculas con seis átomos</b> C <sub>5</sub> H C <sub>5</sub> O C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> CH <sub>3</sub> CN CH <sub>3</sub> NC CH <sub>3</sub> OH CH <sub>3</sub> SH HC <sub>3</sub> NH <sup>+</sup> HC <sub>2</sub> CHO HCONH <sub>2</sub> l-H <sub>2</sub> C <sub>4</sub> C <sub>5</sub> N C <sub>4</sub> H <sub>2</sub>
<b>Moléculas con siete átomos</b> C <sub>6</sub> H CH <sub>2</sub> CHCN CH <sub>3</sub> C <sub>2</sub> H HC <sub>5</sub> N HCOCH <sub>3</sub> NH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> c-C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O CH <sub>2</sub> CHOH
<b>Moléculas con ocho átomos</b> CH <sub>3</sub> C <sub>3</sub> N HCOOCH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub> COOH C <sub>7</sub> H H <sub>2</sub> C <sub>6</sub> CH <sub>2</sub> OHCHO C <sub>6</sub> H <sub>2</sub>
<b>Moléculas con nueve átomos</b> CH <sub>3</sub> C <sub>4</sub> H CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CN (CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> O CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH HC <sub>7</sub> N C <sub>8</sub> H
<b>Moléculas con diez átomos</b> CH <sub>3</sub> C <sub>5</sub> N? (CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CO NH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> COOH? (CH <sub>2</sub> OH) <sub>2</sub> ?
<b>Moléculas con más de diez átomos</b> HC <sub>9</sub> N C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> HC <sub>11</sub> N

existe mayor variedad de movimientos posibles y el número de niveles que pueden poblarse es superior. Este fenómeno dificulta la detección astronómica de especies poliatómicas ya que dada la cantidad de niveles poblados, las líneas espectrales asociadas son mucho más débiles.

Las poblaciones moleculares de los niveles electrónicos, vibracionales y rotacionales pueden ser utilizadas para trazar temperaturas en el rango  $\sim 10$ – $10^4$  K y densidades  $\sim 10^2$ – $10^9$  cm<sup>-3</sup>. Además, las intensidades y perfiles de las líneas moleculares son muchas veces la única herramienta para obtener información cinemática de las regiones más oscurecidas por la extinción visual, donde ocurre por ejemplo el nacimiento y el final de la vida de las estrellas. La abundancia de cada molécula depende de las condiciones físicas de cada región. Por tanto, las abundancias son diferentes en nubes oscuras, nubes difusas, atmósferas estelares, regiones de formación estelar, remanentes de supernovas o envolturas circunestelares. Finalmente, la detección de nuevas moléculas contribuye al desarrollo de la Física Molecular. Especies moleculares como HCO<sup>+</sup>, N<sub>2</sub>H<sup>+</sup> o los radicales C<sub>n</sub>H, fueron identificados y caracterizados espectroscópicamente en el espacio antes de sintetizarse y determinarse sus constantes moleculares en el laboratorio.

## 1.2 ASTRONOMÍA ESPACIAL EN EL IR-LEJANO

Desde el punto de vista observacional, la radiación en el IR-lejano ( $\lambda \sim 30 - 350 \mu\text{m}$ ) ha sido la última en ser explotada por la Astrofísica Molecular debido a la opacidad atmosférica en casi todo el rango espectral y a la sofisticada tecnología requerida por los detectores. Los efectos de la transmisión atmosférica pueden reducirse si los telescopios se embarcan en aviones o globos aerostáticos. Sin embargo, la absorción atmosférica no es nula y el tiempo de observación se reduce al tiempo de vuelo. Las observaciones prolongadas en todo el rango espectral sólo pueden realizarse desde el espacio.

La primera misión espacial en el IR-lejano fue **IRAS** (*IR Astronomical Satellite* [EEUU, Holanda, Reino Unido]; Neugebauer *et al.* 1984) que operó en 1983 durante 10 meses. La mayoría de las observaciones realizadas fueron de fotometría en las bandas a 12, 25, 60 y 100  $\mu\text{m}$ . Sólo se realizó espectroscopia de baja resolución ( $R = \lambda/\Delta\lambda \sim 20 - 60$ ) entre 7.7 y 22.6  $\mu\text{m}$  con el instrumento *LRS* (*Low Resolution Spectrometer*). Posteriormente se lanzó el telescopio espacial **COBE** (*Cosmic Background Explorer* [NASA]), cuyo instrumento principal, *FIRAS* (*Far-IR Absolute Spectrophotometer*; Fixsen *et al.* 1994) proporcionaba espectroscopia de mediana resolución ( $R \sim 100 - 500$ ) en el rango entre 100 y 10000  $\mu\text{m}$ . *COBE* estuvo operando entre 1989 y 1993 pero la mayoría de los trabajos se refieren a la emisión del continuo. Durante 1995 estuvo en funcionamiento **IRTS** (*IR Telescope in Space* [Japón]; Murakami *et al.* 1994) que con el instrumento *FILM* (*Far IR Line Mapper*) proporcionaba espectroscopia de mediana resolución ( $R \sim 400$ ) alrededor de 63 y 158  $\mu\text{m}$ . Finalmente, entre Abril de 1996 y Febrero de 1997 estuvo operativo **MSX** (*Midcourse Space Experiment* [EEUU]) que realizó varias imágenes entre 5 y 30  $\mu\text{m}$ . El mayor inconveniente de las observaciones en el IR-lejano son las bajas temperaturas a las que se tiene que mantener la instrumentación para reducir la contaminación asociada a la emisión térmica de los distintos componentes. El mantenimiento de la refrigeración criostática sólo es efectiva durante cierto tiempo, de ahí la corta duración de todas estas misiones.

El estudio del cielo en el IR-lejano con suficiente resolución espacial y espectral sólo ha sido posible con las primeras observaciones en 1995 de **ISO**<sup>1</sup> (*Infrared Space Observatory*). En la SEC. 1.1 se han descrito los avances históricos realizados en Astrofísica Molecular cada vez que se *abría* una nueva ventana del espectro electromagnético. No hay que escribir mucho acerca del potencial que supone explorar el cielo a longitudes de onda nunca antes observadas.

Al **espectro IR-lejano** de una nube del ISM y CSM contribuyen tres componentes diferenciadas:

- **La emisión del polvo:** Debido a las bajas temperaturas de los granos de polvo en las nubes del ISM y CSM, su emisión térmica sólo puede ser estudiada a longitudes de onda pertenecientes al IR-lejano. En general, los fotones de un campo de radiación UV calientan los granos de polvo y estos son remitidos en forma de continuo en el IR-lejano.
- **Las líneas de estructura fina atómicas:** El desdoblamiento de los niveles electrónicos producido por la interacción entre el espín y el momento angular de los electrones en un átomo da lugar a líneas de estructura fina que se observan en el IR-lejano.

<sup>1</sup>ISO es un proyecto de la ESA con instrumentos financiados por los países miembros (especialmente por los países de los investigadores principales: Francia, Alemania, Holanda y el Reino Unido) y con la participación de ISAS y NASA.

- **Las líneas moleculares:** El interés de esta tesis se centra en la emisión/absorción de las moléculas, a veces para obtener información física sobre ellas mismas y casi siempre para utilizarlas como diagnóstico de las condiciones físicas de las regiones a estudiar. Los diferentes tipos de transiciones moleculares en el espectro IR-lejano del ISM y CSM son:
  - Transiciones rotacionales puras de moléculas ligeras*
  - Modos de vibración de baja energía (flexión)*
  - Transiciones de tipo-b moléculas ligeramente asimétricas*
  - Transiciones de inversión*

### 1.3 EL TELESCOPIO ESPACIAL ISO

La misión espacial *ISO* (Kessler *et al.* 1996) fue lanzada en Noviembre de 1995 y estuvo operando durante más de dos años hasta que se agotó el tanque de  $\sim 2000$  litros de helio superfluido que refrigeraba el sistema a temperaturas entre 2 y 8 K. El telescopio estaba constituido por un espejo primario con un diámetro de  $\sim 60$  cm y cuatro instrumentos diferentes:

- ISOCAM (Cesarsky *et al.* 1996): Una cámara IR que operaba entre 2.5 y 17  $\mu\text{m}$ .
- ISOPHOT (Lemke *et al.* 1996): Espectro-fotómetro que operaba entre 2.5 y 240  $\mu\text{m}$ .
- SWS (de Graaw *et al.* 1996): Espectrómetro para longitudes de onda cortas entre 2.4 y 45.2  $\mu\text{m}$  que proporcionaba resoluciones ( $R \sim 2000 - 20000$ ).
- LWS (Clegg *et al.* 1996): Espectrómetro para longitudes de onda largas entre 43 y 196.9  $\mu\text{m}$  que proporcionaba resoluciones ( $R \sim 200 - 10000$ ).

#### EL INSTRUMENTO ISO/*Long Wavelength Spectrometer*

La mayoría de observaciones que se presentan en esta tesis fueron realizadas con el instrumento *Long Wavelength Spectrometer* (LWS) que cubría el rango espectral entre 43 y 197  $\mu\text{m}$  proporcionando una resolución espectral mediana ( $R \sim 150 - 200$ ) en el modo *grating* y una resolución alta ( $R \sim 6800 - 9700$ ) en el modo *Fabry-Perot*. El instrumento estaba constituido por 10 detectores (SW1-5 y LW1-5) refrigerados a temperaturas criogénicas con helio superfluido. La TABLA 1.2 muestra la apertura efectiva de cada detector LWS y el rango de longitudes de onda observadas. Para el astrónomo, el LWS podía ser utilizado en cuatro modos de observación diferentes definidos como *astronomical observation templates* (AOTs):

- AOT L01: Observaciones de mediana resolución en un intervalo espectral ancho.
- AOT L02: Observaciones de mediana resolución alrededor de líneas espectrales.
- AOT L03: Observaciones de alta resolución en un intervalo espectral ancho.
- AOT L04: Observaciones de alta resolución alrededor de líneas espectrales.

Las especificaciones técnicas de cada modo de observación pueden encontrarse en el manual del usuario del LWS (Gry *et al.* 2002). Todas las observaciones procedentes de **ISO** se identifican con una secuencia de 8 números denominada *Target Dedicated Time* (TDT) donde los 3 primeros dígitos corresponden a la órbita de la observación, los 3 siguientes especifican el número de la observación y los 2 últimos dígitos se refieren a la secuencia de la observación.



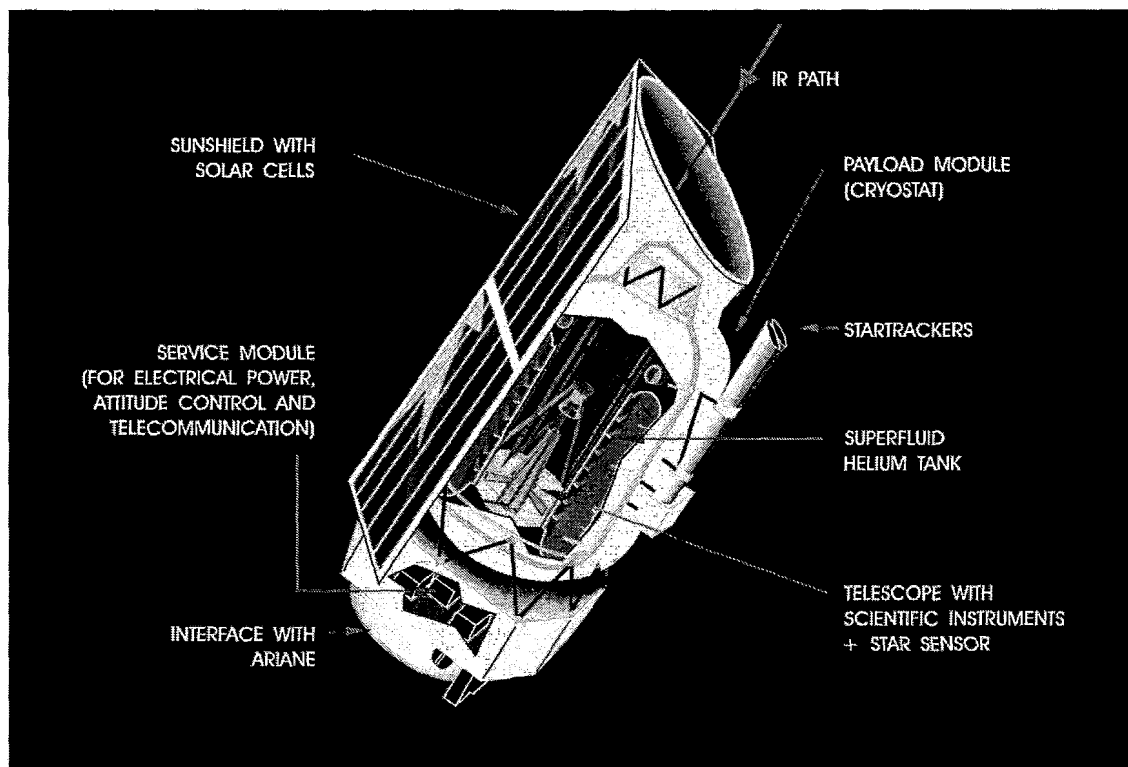


FIGURA 1.1: Esquema y diferentes componentes de ISO (<http://www.iso.vilspa.esa.es/>)

## 1.4 OBJETIVOS Y ESTRUCTURA DE LA TESIS

### OBJETIVOS GENERALES DE LA TESIS

La sensibilidad de la instrumentación embarcada en ISO no tiene comparación alguna con las escasas misiones espaciales efectuadas anteriormente a su lanzamiento (SEC. 1.2) y con KAO (*Kuiper Airborne Observatory* [NASA]; Cameron 1976), telescopio en el IR embarcado en un avión y que estuvo operando entre 1974 y 1996.

Durante los últimos años se ha efectuado un gran avance en el estudio de las condiciones físicas del ISM y CSM a partir de observaciones moleculares en el rango milimétrico del espectro. Sin embargo, estas observaciones están limitadas a longitudes de onda mayores que  $\sim 350 \mu\text{m}$ . Las observaciones con KAO y con anteriores misiones espaciales en la zona de interés de ISO se limitan al estudio de algunas líneas de estructura fina atómicas particularmente intensas. Por tanto, en todo lo concerniente a la espectroscopia molecular, ISO ofrece una visión completamente nueva del ISM y CSM. Este es el **objetivo general** de la tesis:

— Realizar por primera vez **espectroscopia molecular en el IR-lejano** en alguna de las fuentes del ISM y CSM más significativas de la galaxia.

Las regiones estudiadas anteriormente mediante observaciones milimétricas trazan fundamentalmente el *gas molecular frío*. Sin embargo, por razones de opacidad, estas observaciones son poco sensibles al *gas caliente* de las nubes de ISM y de las zonas más internas de las envolturas circunestelares alrededor de estrellas evolucionadas.

TABLA 1.2: *Rango nominal y radio efectivo de los detectores LWS*

Detector (nombre)	Rango nominal ( $\mu\text{m}$ )	Apertura Efectiva ( $''$ )	Detector (nombre)	Rango nominal ( $\mu\text{m}$ )	Apertura Efectiva ( $''$ )
SW1	43.0–50.5	39	LW1	84.0–110.0	38
SW2	49.5–64.0	42	LW2	103.0–128.0	39
SW3	57.0–70.0	43	LW3	123.0–152.0	35
SW4	67.0–82.0	41	LW4	142.0–171.0	34
SW5	76.0–93.0	40	LW5	161.0–196.0	33

Consecuentemente, en este trabajo se pretende aprovechar el potencial de las observaciones en el IR-lejano y la nueva visión que estas pueden proporcionar sobre dos aspectos diferentes de la evolución estelar: las nubes interestelares del Centro Galáctico donde se forman algunas de las estrellas más masivas de la galaxia, y las nubes circunestelares formadas al final de la vida de las estrellas poco masivas. Ambos campos representan un ciclo continuo en la evolución de la materia a través del enriquecimiento en metalicidad del gas de las nubes del ISM y CSM. La comprensión de los fenómenos físicos que tienen lugar en estos entornos **requiere**:

— *Un tratamiento exhaustivo y coherente de la transferencia de radiación.*

Hasta ahora casi no se había tenido en cuenta la influencia de la emisión y absorción de los granos de polvo en la población de los niveles rotacionales y vibracionales de las moléculas. En el IR-lejano, la excitación radiativa puede dominar la población de los niveles moleculares y por lo tanto afecta a la interpretación de las observaciones.

— *Identificación de los componentes moleculares más importantes en la química del ISM y CSM.*

Este aspecto es esencial para determinar la evolución del gas y lleva asociado un profundo conocimiento de la espectroscopia molecular para poder identificar todas las líneas que se observarán en el espectro IR-lejano de las nubes del ISM y CSM.

Las fuentes que constituyen el objeto de este trabajo son: Sgr B2, la región de formación estelar más espectacular del centro de la galaxia y CRL 2688, CRL 618 y NGC 7027, tres envolturas circunestelares en rápida transición hacia la fase de Nebulosa Planetaria. Los objetivos específicos en cada uno de estos ámbitos se irán exponiendo a lo largo de la tesis.

## ESTRUCTURA DE LA TESIS

El presente trabajo está dividido en dos partes (no proporcionales), según se trate el medio interestelar (CAPÍTULOS 3, 4 y 5) o el medio circunestelar (CAPÍTULOS 6, 7 y 8). La estructura en capítulos es como sigue:

### 2) Transferencia de radiación en líneas moleculares:

Se presenta el formalismo básico de la transferencia radiativa aplicada al caso de las líneas moleculares. En particular se describen los modelos utilizados en el resto del trabajo. Estos están basados en el método LVG (*Large Velocity Gradient*) y en métodos *MonteCarlo* no-locales.

### 3) El Centro Galáctico (CG) y la región de Sgr B2:

Se introducen las peculiares características del ISM en el CG y se repasa la estructura, las componentes y las condiciones físicas de Sgr B2, la nube molecular conocida más masiva de la galaxia y que es estudiada en los dos siguientes capítulos.

### 4) Espectroscopia molecular en la envoltura de Sgr B2(M):

Se presenta y analiza por primera vez el espectro en el IR-lejano de Sgr B2(M) con la máxima resolución posible del ISO/LWS ( $\sim 35 \text{ km s}^{-1}$ ). En particular se realiza un análisis detallado de la emisión térmica del polvo y de la absorción producida por las especies  $\text{H}_3\text{O}^+$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{OH}$  y  $\text{C}_3$ .

### 5) La región extensa de Sgr B2:

Se presentan y analizan las observaciones ISO/LWS de mediana resolución a gran escala  $9' \times 27'$  ( $25 \text{ pc} \times 70 \text{ pc}$ ) de la región Sgr B2. Se incluye un análisis del polvo, del gas ionizado, del gas fotodisociado y del gas molecular ( $\text{OH}$ ,  $\text{CH}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NH}$  y  $\text{NH}_2$ ) en toda la región.

### 6) Las proto-Nebulosas Planetarias (PPNes):

Se presentan las propiedades fundamentales de las estrellas en transición entre la fase AGB y la formación de una Nebulosa Planetaria. En particular se introducen las principales características químicas de las gigantescas envolturas circunestelares que se forman en las últimas etapas de la evolución de estrellas poco masivas.

### 7) Evolución química de PPNes carbonadas:

Se analiza el espectro en el IR-lejano de varias envolturas circunestelares ricas en carbono (CRL 2688, CRL 618 y NGC 7027) con el fin de determinar las variaciones más importantes en la evolución química durante la fase de PPNe. Además se presentan los resultados preliminares del primer *survey* espectral de CRL 618 a  $\lambda=1, 2$  y  $3 \text{ mm}$ .

### 8) Nuevas bandas moleculares en el IR-lejano:

Se profundiza en el estudio de los modos de *flexión* de baja energía de los cumulenos  $\text{C}_n$  iniciado en el CAP. 4 con la primera detección de  $\text{C}_3$  en el ISM. En este capítulo se presenta la primera detección (tentativa) de  $\text{C}_4$  en el ISM y CSM, y se discute la importancia de estas especies.

### 9) Sumario, conclusiones y perspectivas:

Se resume brevemente el trabajo realizado, se exponen las conclusiones más importantes del mismo y se analizan las futuras líneas de investigación (principalmente a partir el lanzamiento del *Herschel Space Observatory* [ESA] y la puesta en funcionamiento de *ALMA*).

## Capítulo 2

# Transferencia de radiación en líneas moleculares

En este capítulo se introduce el formalismo básico de la transferencia de radiación en líneas moleculares, herramienta fundamental en el resto del trabajo. Así mismo, se presentan las técnicas numéricas utilizadas para el análisis del espectro IR-lejano de las envolturas interestelares y circunestelares que constituyen el objeto del presente estudio. Con estos métodos se pretende determinar las condiciones físicas y químicas de estas regiones (temperatura, densidad, turbulencia, abundancia de una molécula, etc.) comparando las observaciones astronómicas de varias líneas moleculares con los modelos de transferencia radiativa para esas mismas líneas.

En la literatura pueden encontrarse excelentes tratados sobre el transporte radiativo (Chandrasekhar 1960; Mihalas 1978) y sus aplicaciones particulares a las líneas moleculares (*p.ej.*, Castor 1970; Bernes 1979; González-Alfonso 1995). En lo que sigue se desarrollarán resumidamente aquellos aspectos que ayuden al lector a comprender los modelos utilizados en los siguientes capítulos y permitan aligerar la lectura de los mismos.

### 2.1 TRANSFERENCIA DE RADIACIÓN

El problema de la transferencia de radiación en un medio dominado por especies moleculares requiere la solución conjunta de la ecuación del transporte radiativo para el campo de radiación y las ecuaciones de equilibrio estadístico que determinan la población de los niveles de energía de cada molécula. En el equilibrio termodinámico local (ETL), la población de los niveles sigue la *distribución de Boltzmann* determinada por la temperatura de excitación ( $T_{ex}$ ) de las transiciones, mientras que la distribución en velocidades de las partículas sigue la *distribución de Maxwell* para una temperatura cinética ( $T_k$ ). Bajo las suposiciones del ETL se cumple que  $T_{ex}=T_k$ . Este estado se obtiene idealmente cuando la densidad del medio es suficientemente elevada y la excitación de las moléculas está dominada por las colisiones con otras especies y las transiciones se termalizan a la temperatura cinética de las partículas. Desafortunadamente, la mayoría de las condiciones físicas presentes en el medio interestelar se alejan del ETL y hay que resolver simultáneamente las ecuaciones de equilibrio estadístico para cada nivel de energía y la transferencia de radiación. Como se verá, el problema es no-local ya que la radiación emergente en un punto depende de la población de los niveles moleculares en otros puntos de la región considerada. Además, radiación y poblaciones están acopladas de forma no-lineal.



### 2.1.1 EQUILIBRIO ESTADÍSTICO. CÁLCULO DE POBLACIONES

Las ecuaciones de *equilibrio estadístico* gobiernan la distribución de una molécula en sus posibles estados energéticos (rotacionales, vibracionales o electrónicos), bajo la suposición de que la distribución de poblaciones no varía con el tiempo. Esta condición de *estado estacionario* es válida para la mayoría de condiciones que se tratan en este trabajo.

El objetivo de los modelos de transferencia de radiación es la obtención de la población  $n_i(\mathbf{r})$  [ $\text{cm}^{-3}$ ] de cada nivel molecular ( $i = 1, 2, \dots$ , *niveles considerados*) en el punto  $\mathbf{r}$ , de modo que las poblaciones determinadas a partir del efecto competitivo entre excitaciones radiativas y colisionales sean consistentes con las condiciones físicas de la región estudiada. Para cada punto  $\mathbf{r}$  de la región y cada nivel molecular ( $E_i > E_j$ ) se plantean las siguientes ecuaciones:

$$\frac{dn_i(\mathbf{r})}{dt} = -n_i(\mathbf{r}) \sum_{j \neq i} [R_{ij}(\mathbf{r}) + C_{ij}(\mathbf{r})] + \sum_{j \neq i} n_j(\mathbf{r}) [R_{ji}(\mathbf{r}) + C_{ji}(\mathbf{r})] \quad (2.1)$$

$$\frac{dn_i(\mathbf{r})}{dt} = 0 \quad (\text{estado estacionario}) \quad (2.2)$$

Este conjunto no forma un sistema de ecuaciones linealmente independiente y se completa con la condición de que la densidad total de moléculas  $n(\mathbf{r})$  [ $\text{cm}^{-3}$ ] en el punto  $\mathbf{r}$  sea:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{\text{niveles}} n_i(\mathbf{r}) \quad (2.3)$$

En 2.1,  $C_{ij}$  y  $R_{ij}$  [ $\text{s}^{-1}$ ] son las probabilidades de transición colisionales y radiativas entre los niveles  $i$  y  $j$  respectivamente. Las probabilidades de transición colisional (véase la FIG. 2.1) se definen como:

$$C_{ij}(\mathbf{r}) = \gamma_{ij} n(\mathbf{r}) \quad (2.4)$$

$$C_{ji}(\mathbf{r}) = \gamma_{ji} n(\mathbf{r}) \quad (2.5)$$

donde los coeficientes colisionales,  $\gamma_{ij}$  y  $\gamma_{ji}$  [ $\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$ ], son integrales de las secciones eficaces de colisión entre las partículas colisionantes. En general estas secciones son difíciles de determinar, bien mediante medidas directas en el laboratorio, bien mediante cálculos teóricos *ab initio*. Las probabilidades de transición colisional están relacionadas entre sí por la condición de *balance detallado* que implica que en equilibrio el número de excitaciones y des-excitaciones colisionales para cada energía es el mismo. Las probabilidades de transición radiativa se escriben como:

$$R_{ij}(\mathbf{r}) = A_{ij} + B_{ij} \bar{J}_{ij}(\mathbf{r}) \quad (2.6)$$

$$R_{ji}(\mathbf{r}) = B_{ji} \bar{J}_{ji}(\mathbf{r}) \quad (2.7)$$

donde  $A_{ij}$  [ $\text{s}^{-1}$ ] es el coeficiente de Einstein de emisión espontánea, y  $B_{ij}$  y  $B_{ji}$  [ $\text{cm}^2 \text{erg}^{-1} \text{s}^{-1}$ ] son los coeficientes de Einstein de emisión y absorción inducida. Los coeficientes de Einstein no son independientes entre sí. Sus relaciones se pueden encontrar en el límite del ETL donde el número de excitaciones y des-excitaciones radiativas es igual. Se demuestra entonces que:

$$A_{ij} = \frac{2h\nu_{ij}^3}{c^2} B_{ij} \quad g_i B_{ij} = g_j B_{ji} \quad (2.8)$$

donde  $\nu_{ij}$  es la frecuencia en reposo de la transición  $ij$ , y  $g_i$  y  $g_j$  son las degeneraciones de los niveles  $i$  y  $j$ . Estas relaciones se mantienen fuera del ETL. Finalmente,  $\bar{J}_{ij}(\mathbf{r})$  representa la intensidad de radiación en el punto  $\mathbf{r}$  que viaja según la dirección dada por el vector unitario  $\mathbf{k}$ , en la transición molecular  $ij$  y promediada en ángulos y frecuencias. Se escribe como:

$$\bar{J}_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \int d\nu I_{ij}(\mathbf{k}, \nu) \phi_{ij}(\mathbf{k}, \nu) \quad (2.9)$$

donde  $I_{ij}$  [ $\text{erg s}^{-1} \text{cm}^{-2} \text{sr}^{-1} \text{Hz}^{-1}$ ] es la intensidad de radiación específica procedente de la transición  $ij$  que llega al punto  $\mathbf{r}$  y  $\phi_{ij}$  es el perfil de la línea normalizado (véase la SEC. 2.1.2).  $\bar{J}_{ij}$  está gobernada por la *ecuación de transporte radiativo* (ETR) y es proporcional a la función fuente y a la opacidad. Estas se determinan a partir de las poblaciones de los niveles moleculares en cada punto de la región considerada.

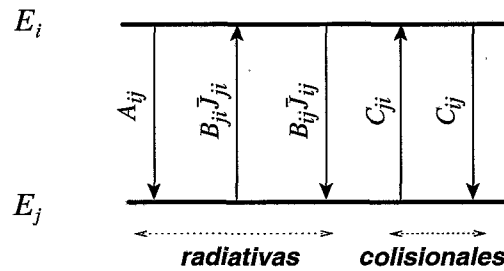


FIGURA 2.1: Tipos de transiciones radiativas y colisionales entre dos niveles moleculares.

El objetivo de los modelos de transferencia radiativa usados en este trabajo consiste en resolver el sistema de ecuaciones 2.1 y 2.3 para cada punto de la región y obtener la población de cada nivel. Posteriormente se pueden calcular las intensidades emergentes y compararlas con las observaciones astronómicas. El sistema de ecuaciones no es lineal ya que las intensidades dependen de las poblaciones de los niveles de forma no-lineal (el campo de radiación depende implícitamente de  $n_i$ ). Además, el problema es no-local ya que el campo de radiación en un punto depende de las poblaciones moleculares en otros puntos. Los diferentes métodos iterativos utilizados para alcanzar la solución se diferencian en la técnica empleada para determinar  $\bar{J}_{ij}$ .

### 2.1.2 EL PERFIL DE UNA LÍNEA MOLECULAR

El perfil de una línea espectral depende del fenómeno físico del *ensanchamiento* y del *campo de velocidades* en la nube. El ensanchamiento de las líneas moleculares se divide en:

- “Ensanchamiento natural” (Lorentziano): presente en cualquier circunstancia como consecuencia de la *vida media* finita de los niveles excitados de una molécula.
- “Ensanchamiento Doppler” (Gaussiano): debido al movimiento individual de las moléculas de un gas según una distribución en velocidades (ensanchamiento térmico) y a movimientos colectivos a pequeña escala de las moléculas (microturbulencia).
- “Ensanchamiento colisional o por presión” (Lorentziano): debido a los efectos producidos en la molécula radiante por la interacción con otras partículas del gas.
- “Ensanchamiento por movimientos sistemáticos a gran escala”: debidos a la macroturbulencia de la región, a la rotación estelar, etc. Son los más difíciles de parametrizar.

El perfil de las líneas moleculares generadas en el medio interestelar y circunestelar viene determinado por la distribución en velocidades de las moléculas en el nivel  $i$ . Cuando el ensanchamiento es de origen térmico y microturbulento la distribución es de tipo *Maxwell* e independiente del nivel  $i$  considerado (hipótesis de *redistribución completa en frecuencias* que implica que  $\phi_{ij} = \phi_{ji}$ ). El perfil Doppler  $\phi_{ij}$  resultante es la convolución de los dos perfiles gaussianos (térmico y microturbulento) y se puede escribir como:

$$\phi_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, \nu) = \frac{1}{\Delta\nu_D(\mathbf{r})\sqrt{\pi}} \exp \left[ - \left( \frac{\nu - \nu_{ij} - \nu_{ij} \frac{\mathbf{v}_{CM} \cdot \mathbf{k}}{c}}{\Delta\nu_D(\mathbf{r})} \right)^2 \right] \quad (2.10)$$

donde  $\Delta\nu_D$  [Hz] es la anchura Doppler del perfil en el punto  $\mathbf{r}$  determinada por la temperatura cinética de la región y la microturbulencia, y  $\mathbf{v}_{CM}$  es el vector velocidad del centro de masas del gas en  $\mathbf{r}$ .  $\phi_{ij} d\nu$  determina la fracción de moléculas en el nivel  $i$  con velocidad radial entre  $v = c(\frac{\nu_{ij} - \nu}{\nu_{ij}})$  y  $v + dv$  en la dirección de  $\mathbf{k}$  que produce emisiones o absorciones estimuladas de fotones de frecuencia  $\nu$ . Esta expresión indica que la frecuencia de los fotones puede expresarse en función de la velocidad radial aunque los desplazamientos respecto a la frecuencia en reposo no estén producidos por efecto Doppler. Para frecuencias en la transición  $ij$  tales que  $\nu < \nu_{ij}$  ( $v > 0$ ) se habla de *desplazamiento al rojo*, mientras que para  $\nu > \nu_{ij}$  ( $v < 0$ ) se habla de *desplazamiento al azul*. Ignorando los posibles efectos producidos por la emisión/absorción del polvo y el recubrimiento entre líneas (radiación procedente de otra transición próxima a la  $ij$ ) podemos escribir el perfil en función de  $v$  como:

$$\phi(\mathbf{r}, \mathbf{k}, v) = \frac{1}{\Delta\nu_D(\mathbf{r})\sqrt{\pi}} \exp \left[ - \left( \frac{v + \mathbf{v}_{CM} \cdot \mathbf{k}}{\Delta\nu_D(\mathbf{r})} \right)^2 \right] \quad (2.11)$$

que ahora no depende de la transición considerada y donde  $\Delta\nu_D$  [km s<sup>-1</sup>] es la anchura del perfil Doppler en  $\mathbf{r}$ . La intensidad de radiación específica  $I_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, \nu)$  con  $\nu$  próxima a  $\nu_{ij}$  puede ser también expresada en términos de la velocidad radial. Entonces, la intensidad promedio se obtiene integrando sobre ángulos y velocidades:

$$\bar{J}_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \int dv I_{ij}(\mathbf{k}, v) \phi(\mathbf{k}, v) \quad (2.12)$$

### 2.1.3 LA ECUACIÓN DE TRANSPORTE RADIATIVO

La determinación de  $\bar{J}_{ij}(\mathbf{r})$  requiere el cálculo de la intensidad específica en  $\mathbf{r}$  para cada frecuencia  $\nu$  y ángulo sólido  $\Omega$ . La ETR gobierna la propagación de la radiación a través de un medio y describe la variación de la intensidad de un haz de radiación que atraviesa una capa diferencial de material con espesor  $ds$ . En lo que sigue se considera el caso de radiación  $\nu$  próxima a  $\nu_{ij}$  que sólo puede ser emitida/absorbida por la transición molecular  $ij$ . La variación de la intensidad se relaciona con las propiedades del material mediante la expresión:

$$\frac{dI_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, \nu)}{ds} = j_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, \nu) + \alpha_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, \nu) \cdot I_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, \nu) \quad (2.13)$$

donde  $\alpha_{ij}$  [cm<sup>-1</sup>] es el *coeficiente de absorción* que representa la atenuación de la radiación que viaja según  $\mathbf{k}$  en el punto  $\mathbf{r}$  por unidad de longitud y  $j_{ij}$  [erg cm<sup>-3</sup>s<sup>-1</sup> Hz<sup>-1</sup> sr<sup>-1</sup>] es el *coeficiente de emisión*, contribución a la intensidad por unidad de longitud de la transición molecular  $ij$ .

En función de la velocidad radial  $v$ , estos coeficientes se definen como:

$$\alpha_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, v) = \frac{hc}{4\pi} (n_j(\mathbf{r})B_{ji} - n_i(\mathbf{r})B_{ij}) \phi(\mathbf{r}, \mathbf{k}, v) \quad (2.14)$$

$$j_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, v) = \frac{hc}{4\pi} n_i(\mathbf{r}) A_{ij} \phi(\mathbf{r}, \mathbf{k}, v) \quad (2.15)$$

Podemos ahora definir la *función fuente* del material como:

$$S_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, v) = \frac{j_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, v)}{\alpha_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, v)} \quad (2.16)$$

Teniendo en cuenta que la temperatura de excitación de la transición  $ij$  ( $T_{ex, ij}$ )<sup>1</sup> en el punto  $\mathbf{r}$  se define como:

$$\frac{n_i(\mathbf{r})}{n_j(\mathbf{r})} = \frac{g_i}{g_j} \exp\left(-\frac{h\nu_{ij}}{T_{ex, ij}}\right) \quad (2.17)$$

y las relaciones entre los coeficientes de Einstein 2.8, se puede demostrar que:

$$S_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{2h\nu_{ij}^3}{c^2} \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu_{ij}}{kT_{ex, ij}(\mathbf{r})}\right) - 1} = B(\nu_{ij}, T_{ex, ij}) \quad (2.18)$$

Es decir, si la relación entre las poblaciones de dos niveles moleculares está determinada por la temperatura de excitación, la función fuente es una función de Planck<sup>2</sup> (cuerpo negro) a la temperatura de excitación  $T_{ex, ij}$  de la transición.

## PROFUNDIDAD ÓPTICA

La *profundidad óptica diferencial* a través de la capa de espesor diferencial  $ds$  en la dirección de  $\mathbf{k}$  se define como:

$$d\tau_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, v) = \alpha_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, v) ds \quad (2.19)$$

Integrando a lo largo de la trayectoria rectilínea de longitud  $L$  entre los puntos  $\mathbf{a}$  y  $\mathbf{b}$  (FIG. 2.2) se obtiene la *opacidad total* de dicha trayectoria:

$$\tau_{ij}(\mathbf{a}, \mathbf{b}, v) = \int_0^L ds \alpha_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, v) \quad (2.20)$$

donde se considera que  $\tau_{ij}(\mathbf{a}, \mathbf{a}, v) = 0$ . La ETR puede escribirse de forma más intuitiva en función de la opacidad y la función fuente como:

$$\frac{dI_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, v)}{d\tau_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, v)} = S_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, v) - I_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, v) \quad (2.21)$$

Integrando la ecuación se encuentra su solución formal:

$$I_{ij}(\mathbf{b}) = I_{ij}(\mathbf{a}) \exp[-\tau_{ij}(\mathbf{a}, \mathbf{b})] + \int_0^{\tau_{ij}(\mathbf{a}, \mathbf{b})} d\tau_{ij}(\mathbf{a}, \mathbf{r}) S_{ij}(\mathbf{r}) \exp[-\tau_{ij}(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - \tau_{ij}(\mathbf{a}, \mathbf{r})] \quad (2.22)$$

<sup>1</sup>- Si  $T_{ex} < T_k$  se dice que la línea está subtermicamente excitada. - Si  $T_{ex} = T_k$  se dice que la línea está termalizada. - Si  $T_{ex} > T_k$  se dice que la línea tiene excitación supratérmica. En los casos en que  $T_{ex} > 0$  y  $\tau > 0 \Rightarrow \frac{n_j}{g_j} > \frac{n_i}{g_i}$  se habla de "emisión térmica". En los casos en que  $T_{ex} < 0$  y  $\tau < 0 \Rightarrow \frac{n_j}{g_j} < \frac{n_i}{g_i}$ , las poblaciones de los niveles asociados están invertidas y se habla de "emisión maser".

<sup>2</sup>Puesto que  $I_\lambda d\lambda = I_\nu d\nu$  se puede escribir también como  $B(\lambda_{ij}, T_{ex, ij}) = \frac{2hc^2}{\lambda^2} \left(\exp\left(\frac{hc}{\lambda k T_{ex, ij}}\right) - 1\right)^{-1}$ .

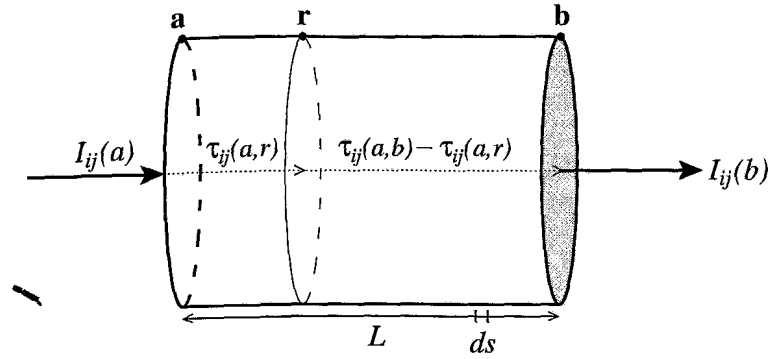


FIGURA 2.2: Representación esquemática de la solución de la ecuación de transporte radiativo.

donde se ha obviado explícitamente la dependencia de  $\mathbf{k}$  y  $v$ . La solución de la ETR indica que la intensidad de radiación es una función no-local de los coeficientes de emisión y absorción del material (a través de la función fuente). El primer miembro al lado derecho de la igualdad describe la atenuación de la intensidad de radiación debida a la absorción que produce el material después de recorrer la trayectoria que une los puntos  $a$  y  $b$ . El segundo término representa la contribución a la intensidad de radiación en  $b$  del material presente a lo largo de la trayectoria atenuada por un factor que depende de la opacidad. En la FIG. 2.2 se muestra una representación esquemática de la solución de la ETR.

Resolviendo las ecuaciones de equilibrio estadístico (ECS. 2.1 y 2.3) para el caso de un sistema de dos niveles  $j$  =inferior e  $i$  =superior se obtiene que:

$$\exp \left[ -\frac{h\nu_{ij}}{kT_{ex}} \right] = \frac{\exp \left[ -\frac{h\nu_{ij}}{kT_k} \right] + \frac{c^2 A_{ij} \bar{J}_{ij}}{2h C_{ij} \nu_{ij}^3}}{1 + \frac{A_{ij}}{C_{ij}} \left( 1 + \frac{c^2 \bar{J}_{ij}}{2h \nu_{ij}^3} \right)} \quad (2.23)$$

donde tanto  $\bar{J}_{ij}$ ,  $C_{ij}$ ,  $T_k$ ,  $T_{ex}$  pueden ser funciones de la posición  $\mathbf{r}$ . En ausencia de fuentes de continuo intensas, la intensidad de radiación será débil si la línea es ópticamente delgada ( $\tau_{ij} < 1$ ). Sustituyendo  $\bar{J}_{ij} \simeq 0$  en la ecuación anterior se obtiene que:

$$T_{ex} = \frac{T_k}{1 + \frac{kT_k}{h\nu_{ij}} \ln \left( 1 + \frac{A_{ij}}{C_{ij}} \right)} \quad (2.24)$$

relación que muestra que la  $T_{ex}$  de la transición estará siempre por debajo de la  $T_k$  del medio. La termalización se alcanza cuando los coeficientes de Einstein para la emisión espontánea son mucho menores que los coeficientes colisionales de aquellas transiciones  $ij$  que involucran los niveles apreciablemente poblados ( $A_{ij} \ll C_{ij}$ ). Este es el caso de las especies moleculares con momento dipolar eléctrico pequeño (p.ej., CO). Si en la Ec. 2.23 todos los términos proporcionales a  $A_{ij}$  se hacen despreciables, se obtiene  $T_{ex} = T_k$ . Para alcanzar la termalización de la transición  $ij$ , la densidad del medio ha de ser mayor que la *densidad crítica de termalización* para dicha transición. Valor que aproximadamente vale  $n_{cr} \simeq A_{ij}/\gamma_{ij}$  [ $\text{cm}^{-3}$ ]. En las especies con momento dipolar eléctrico elevado (p.ej.,  $\text{HCO}^+$ ), la densidad crítica es tan alta que las colisiones con otras partículas del gas son muy poco importantes en la excitación de la molécula y difícilmente se alcanza la termalización.

La expresión Ec. 2.24 muestra también que si en la región existen gradientes de temperatura cinética y/o de densidad, la temperatura de excitación no será uniforme.

### ATRAPAMIENTO RADIATIVO

Puede ocurrir que la intensidad de radiación  $\bar{J}_{ij}$  en un punto  $\mathbf{r}$  sea absorbida en otro punto  $\mathbf{r}'$  antes de escapar de la región considerada. Este fenómeno se denomina *atrapamiento radiativo* y provoca que la  $T_{ex}$  de la transición sea superior al valor dado por la EC. 2.24. El valor más elevado de  $T_{ex}$  ocurrirá en las regiones centrales de la región donde la radiación incide desde todas las direcciones. Sin embargo,  $\bar{J}_{ij}$  en el centro de la región no puede ser mayor que la emisión de un cuerpo negro a la  $T_{ex}$  de la transición. Sustituyendo  $\bar{J}_{ij} = B(\nu_{ij}, T_{ex, ij})$  (límite al que se aproximan las líneas ópticamente espesas) en la EC. 2.23 se obtiene que  $T_{ex} = T_k$ . Por tanto, el atrapamiento radiativo provoca la termalización de las transiciones. Dependiendo de la magnitud del efecto, se pueden obtener diferentes  $T_{ex, ij}$  en la región aunque  $T_k$  y la densidad de partículas sean uniformes.

### RESOLUCIÓN DE LA ETR PARA LÍMITES SENCILLOS

Si la región estudiada es isoterma y con  $T_{ex, ij}$  uniforme, la función fuente será constante dentro de la región. La EC. 2.22, solución de la ETR puede escribirse entonces como:

$$I_{ij}^L(\mathbf{b}) = I_{ij}(\mathbf{b}) - I_c(\nu_{ij}, T_c) = [B(\nu_{ij}, T_{ex}) - B(\nu_{ij}, T_c)] (1 - \exp[-\tau_{ij}(\mathbf{a}, \mathbf{b})]) \quad (2.25)$$

donde  $I_{ij}^L$  es la intensidad emergente de la línea sobre el nivel de continuo,  $B(\nu_{ij}, T_c)$  es la *distribución de Planck* a la temperatura del continuo ( $T_c=2.7$  K para la radiación de fondo cosmológica en observaciones milimétricas o  $T_c=T_{polvo}$  en el IR-lejano). A continuación se presentan los dos límites obvios de la solución de la ETR que ayudan a comprender su sentido físico.

- Para una transición *ópticamente espesa* ( $\tau_{ij}(\mathbf{a}, \mathbf{b}) \gg 1$ ) en el IR-lejano, la solución de la ETR es:

$$I_{ij}^L(\mathbf{b}) = [B(\nu_{ij}, T_{ex}) - B(\nu_{ij}, T_{polvo})] \quad (2.26)$$

es decir, conocida  $T_{polvo}$ , la emisión/absorción ópticamente espesa sólo proporciona información sobre la temperatura de excitación (o sobre  $T_k$  si la transición  $ij$  está termalizada).

- Si la transición es *ópticamente delgada* ( $\tau_{ij}(\mathbf{a}, \mathbf{b}) \ll 1$ ) se pueden desarrollar la exponenciales para obtener:

$$I_{ij}^L(\mathbf{b}) = [B(\nu_{ij}, T_{ex}) - B(\nu_{ij}, T_{polvo})] \tau_{ij}(\mathbf{a}, \mathbf{b}) \quad (2.27)$$

es decir, las líneas ópticamente delgadas son proporcionales a la densidad de columna de la especie molecular considerada a través de la opacidad de la transición.

### DENSIDAD DE COLUMNA

Introduciendo convenientemente las relaciones entre los coeficientes de Einstein en la EC. 2.14 el coeficiente de absorción se puede escribir en función de la velocidad radial como:

$$\alpha_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, v) = \frac{c^3}{8\pi\nu_{ij}^3} A_{ij} n_i(\mathbf{r}) (e^{\frac{h\nu_{ij}}{kT_{ex}}} - 1) \phi(\mathbf{r}, \mathbf{k}, v) \quad (2.28)$$

Suponiendo que los niveles de energía están poblados según una *distribución de Boltzmann*:

$$n_i(\mathbf{r}) = \frac{g_i n(\mathbf{r})}{Q(T_{ex})} \exp\left(-\frac{E_i}{kT_{ex}}\right) \quad (2.29)$$

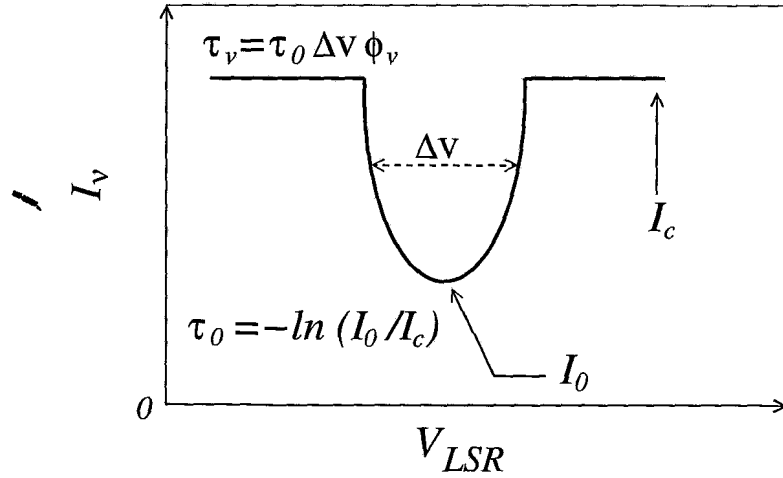


FIGURA 2.3: Parámetros de una línea espectral en absorción.

donde la función de partición<sup>3</sup> vale:

$$Q(T_{ex}) = \sum_k^{niveles} g_k \exp\left(-\frac{E_k}{kT_{ex}}\right) \quad (2.30)$$

e integrando la EC. 2.28 en velocidades a lo largo de la trayectoria rectilínea entre **a** y **b** se obtiene  $\int dv \tau_{ij}(\mathbf{a}, \mathbf{b}, v)$ , cuyo valor es:

$$\int dv \int_a^b ds \alpha_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, v) = \frac{c^3}{8\pi} \frac{A_{ij} g_i}{\nu_{ij}^3} \frac{e^{-\frac{E_i}{kT_{ex}}}}{Q(T_{ex})} \left( e^{\frac{h\nu_{ij}}{kT_{ex}}} - 1 \right) \int dv \int_a^b ds n(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}, \mathbf{k}, v) \quad (2.31)$$

Teniendo en cuenta que la última integral en 2.31 es la densidad de columna total de moléculas ( $N_{tot}$  [cm<sup>-2</sup>]) entre los puntos **a** y **b**, y que  $\int dv \tau_{ij} = \int dv \phi \tau_0 \Delta v \simeq \tau_0 \Delta v$ , donde  $\tau_0$  es la opacidad en el centro de la línea y  $\Delta v$  su anchura a media potencia (FIG. 2.3), se tiene que:

$$N_{tot}(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \frac{8\pi\nu_{ij}^3}{c^3} \frac{Q(T_{ex})}{g_i A_{ij}} \frac{e^{-\frac{E_i}{kT_{ex}}}}{e^{\frac{h\nu_{ij}}{kT_{ex}}} - 1} \tau_0 \Delta v \quad (2.32)$$

En la aproximación ETL, las transiciones están termalizadas a  $T_k$  y  $N_{tot}(\mathbf{a}, \mathbf{b})$  es una relación exacta. La EC. 2.32 constituye una buena aproximación a la densidad de columna real cuando, por ejemplo, no existe información sobre los coeficientes colisionales de la molécula estudiada.

Si observamos una línea en absorción (FIG. 2.3), se puede estimar la opacidad aparente en centro de la línea ( $\tau_0$ ) a partir del cociente entre la intensidad total en el centro de la línea ( $I_0$ ) y la intensidad del continuo a esa frecuencia ( $I_c$ ) mediante la expresión:

$$\tau_0 = -\ln(I_0/I_c) = -\ln\left(1 - \frac{|I_0^L|}{I_c}\right) \quad (2.33)$$

<sup>3</sup>En la literatura existen varias relaciones aproximadas para calcular  $Q(T_{ex})$  que dependen de los grados de libertad de la molécula. A bajas temperaturas (propias del ISM), la función de partición tiene que ser calculada numéricamente sin utilizar ninguna aproximación, es decir, sumando sobre los niveles de menor energía.

donde como siempre  $I_0^L = I_0 - I_c$ . Este método da buenos resultados para opacidades pequeñas. Si sólo se está interesado en la población del nivel inferior  $j$  y no se consideran los efectos de la emisión estimulada ( $B_{ij} \approx 0$ ), es fácil demostrar que:

$$N_j(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \frac{8\pi}{c^3} \frac{g_j}{g_i} \frac{\nu_{ij}^3}{A_{ij}} \tau_0 \Delta\nu \quad (2.34)$$

relación que puede ser una buena aproximación a  $N_{tot}(\mathbf{a}, \mathbf{b})$  cuando las condiciones de excitación en la nube son tan bajas que sólo se observa el nivel de energía fundamental.

### CASO GENERAL: EFECTO DEL POLVO Y LÍNEAS RECUBIERTAS

En el caso más general donde las frecuencias de un grupo  $g$  de transiciones moleculares  $kl$  son tan próximas entre sí que un fotón de frecuencia  $\nu$  procedente de estas transiciones o del continuo puede ser absorbido en cualquiera de ellas y donde además hay que tener en cuenta los coeficientes de absorción y emisión del polvo ( $\alpha_{polvo}$  y  $j_{polvo}$ ), la función fuente es más complicada que la derivada en la EC. 2.18.

Para la resolución de este problema se introduce una frecuencia de referencia para el grupo,  $\nu_g$ , definida como la media aritmética de las frecuencias mínima y máxima del grupo. Las frecuencias  $\nu_{kl}$  de las transiciones individuales pasan a expresarse en función de  $\nu_g$  en términos de la velocidad como  $\nu_{kl,g} = c(1 - \nu_{ij}/\nu_g)$  y las de los fotones  $\nu$  como  $\nu = c(1 - \nu/\nu_g)$ . El perfil Doppler de la transición  $kl$  del grupo  $g$  es:

$$\phi_{kl,g}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, \nu) = \frac{1}{\Delta\nu_D(\mathbf{r})\sqrt{\pi}} \exp \left[ - \left( \frac{\nu + \mathbf{v}_{CM} \cdot \mathbf{k} - \nu_{kl,g}}{\Delta\nu_D(\mathbf{r})} \right)^2 \right] \quad (2.35)$$

que ahora si depende de la transición  $kl$  del grupo en particular. Por su parte, la función fuente del grupo  $g$  de transiciones recubiertas que incluye los efectos del polvo:

$$S_g(\mathbf{r}, \mathbf{k}, \nu) = \frac{j_g(\mathbf{r}, \mathbf{k}, \nu) + j_{polvo,g}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, \nu)}{\alpha_g(\mathbf{r}, \mathbf{k}, \nu) + \alpha_{polvo,g}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, \nu)} \quad (2.36)$$

se escribe como:

$$S_g(\mathbf{r}, \mathbf{k}, \nu) = \frac{\sum_{kl} \frac{hc}{4\pi} n_k A_{kl} \phi_{kl,g} + j_{polvo,g}}{\sum_{kl} \frac{hc}{4\pi} (n_l B_{lk} - n_k B_{kl}) \phi_{kl,g} + \alpha_{polvo,g}} \quad (2.37)$$

donde  $j_{polvo,g}$  y  $\alpha_{polvo,g}$  son los coeficientes de emisión y absorción del polvo a la frecuencia  $\nu_g$  en el punto  $\mathbf{r}$ . Notese que la función fuente depende ahora implícitamente de la velocidad del gas en cada punto (a través de  $\phi$ ). Por tanto, incluso cuando la distribución de poblaciones en los distintos niveles sea uniforme,  $S_g$  puede cambiar de un punto a otro si la velocidad del gas cambia. En el IR-lejano, la presencia de un intenso campo de radiación en el continuo producido por la emisión ópticamente espesa del polvo puede provocar que las temperaturas de excitación aumenten su valor esperado (sin considerar los efectos del polvo) y se hagan próximas a  $T_{polvo}$ .

## 2.2 GEOMETRÍA ESFÉRICA

En esta sección se va a suponer un medio con simetría esférica en el cual todas las propiedades del gas sólo dependen de la distancia radial al centro de la esfera. Con ello se pretende tener en cuenta los efectos de curvatura que puedan afectar a las nubes interestelares



y circunestelares que se estudiarán en los siguientes capítulos. Por lo tanto, hay que tratar el transporte radiativo para el caso de una esfera de radio  $R$ . Esta geometría es especialmente adecuada para modelar una nube molecular esférica con una fuente de continuo central de radio  $r_c$  (estrella central o condensación de gas) en su interior. Antes de calcular  $\bar{J}_{ij}$ , cuyo conocimiento es necesario para determinar las probabilidades de transición radiativas, hay que resolver la ETR en geometría esférica. La obtención de la ETR puede encontrarse en la literatura *p.ej.*, en Chandrasekhar (1960) o Mihalas (1978) y se escribe como:

$$\mu \frac{\partial I_{ij}(r, \mu, \nu)}{\partial r} + \frac{1 - \mu^2}{r} \frac{\partial I_{ij}(r, \mu, \nu)}{\partial \mu} = j_{ij}(r, \mu, \nu) - \alpha_{ij}(r, \mu, \nu) \cdot I_{ij}(r, \mu, \nu) \quad (2.38)$$

Con  $\mu = \cos \theta$ , donde  $\theta$  es el ángulo que forma el rayo y la normal a la superficie de cada punto. La geometría del problema indica que un punto cualquiera de la esfera viene determinado por una pareja de coordenadas,  $(z, p)$  o  $(r, \mu)$  (véase la FIG. 2.4). La coordenada cilíndrica,  $p$ , se conoce como *parámetro de impacto*. Como indica la figura, el gas molecular situado a una distancia radial  $r = \sqrt{p^2 + z^2}$  se expande o colapsa con una velocidad radial  $v(r)$ .

La EC. 2.38 en derivadas parciales se resuelve convenientemente a lo largo de las trayectorias determinadas por los parámetros de impacto transformándose en una ecuación diferencial ordinaria para cada parámetro de impacto  $p$  de expresión:

$$\pm \frac{\partial I_{ij}(z, p, \nu)}{\partial z} = j_{ij}(z, p, \nu) + \alpha_{ij}(z, p, \nu) \cdot I_{ij}(z, p, \nu) \quad (2.39)$$

donde  $\pm$  corresponde a la intensidad de radiación que emerge o se aleja del observador situado en  $z = -\infty$ . Esta expresión es idéntica al caso plano-paralelo dado por la EC. 2.13. Para la resolución de la EC. 2.39 hay que proporcionar condiciones de contorno en la superficie de la nube  $I(R, p)$  y en la superficie de la fuente central  $I(r_c, p)$ .

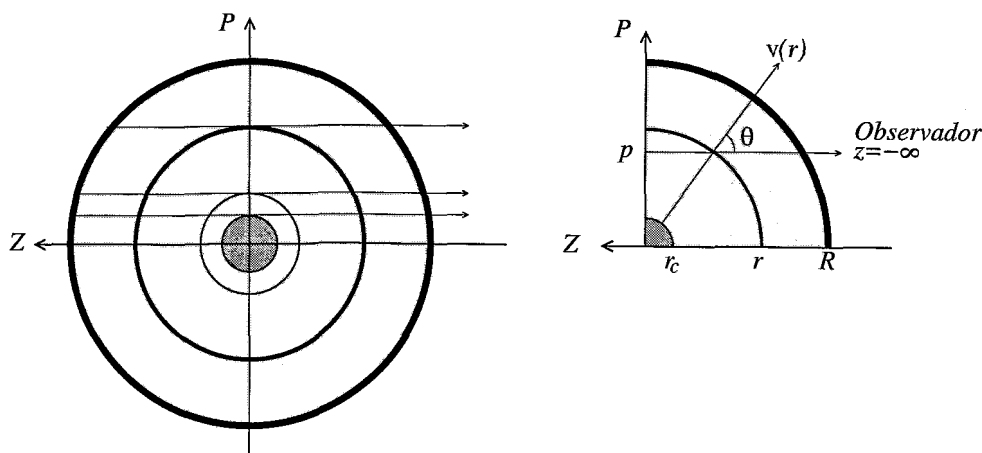


FIGURA 2.4: Notación empleada para resolver la ecuación de transporte radiativo en geometría esférica y parámetros de impacto ( $p$ ) que simplifican su resolución.

En resumen, la transferencia de radiación en una nube esférica equivale a la resolución de  $n_p$  ECS. 2.39, donde  $n_p$  es el número total de parámetros de impacto considerados en la discretización de la esfera. La forma en que la intensidad de radiación  $\bar{J}_{ij}$  es calculada caracteriza los diferentes métodos de resolución de las ecuaciones de equilibrio estadístico. En las dos siguientes secciones se exponen las metodologías que se han empleado en el resto de esta tesis.

## 2.3 LA APROXIMACIÓN LVG

La resolución computacional de la ETR y de las ecuaciones de equilibrio estadístico por métodos iterativos era hasta hace unos años una tarea demasiado costosa en términos del tiempo de cálculo necesario y de la memoria requerida. Este hecho obligó a desarrollar técnicas aproximadas que permitían obtener una solución cercana a la correcta reduciendo los costes computacionales. Una de las técnicas desarrolladas, la *aproximación de Sobolev*, es hoy en día una herramienta clásica en el dominio de la Astrofísica Molecular. Esta aproximación fue desarrollada por primera vez a finales de los años 50 por Sobolev (1958; 1960) y aplicada a la emisión de líneas atómicas en envolturas circunestelares por Castor (1970).

En esta metodología se supone que existe un considerable gradiente de velocidades en el medio (de ahí su tradicional denominación, "*Large Velocity Gradient*", LVG) que desacopla radiativamente los puntos físicamente próximos debido al efecto Doppler. Para simplificar aún más el cálculo, también se supone que en los puntos conectados por la radiación (regiones de acoplamiento radiativo), las condiciones físicas ( $T_k$ ,  $n(H_2)$  y abundancias moleculares) son las mismas, de modo que las poblaciones de los niveles moleculares en estas regiones no varían.

Con estas dos simplificaciones, la intensidad de radiación promedio  $\bar{J}_{ij}$  en un punto del interior de una región de acoplamiento sólo depende de las poblaciones de dicha región. Además, los fotones escapar de la región de acoplamiento llegarán al observador sin ser absorbidos por el resto de la nube. En este formalismo, la probabilidad de que un fotón abandone una región de acoplamiento viene dada por las denominadas *probabilidades de escape*. Aunque el problema sigue siendo no-lineal, la transferencia de radiación es ahora local.

En esta sección se resume brevemente el formalismo básico del método LVG para el caso esféricamente simétrico utilizado en los siguientes capítulos.

La intensidad de radiación promedio  $\bar{J}_{ij}$  (ahora local) que aparece en las ecuaciones de equilibrio estadístico se puede escribir como (véase el desarrollo completo en Castor 1970):

$$\bar{J}_{ij}(r) = S_{ij}(1 - \beta_{ij}(r)) + I(\nu_{ij}, T_c) \beta_{ij}^c(r) + I(\nu_{ij}, T_{bg}) \beta_{ij}^e(r) \quad (2.40)$$

donde se asume que en el sistema de referencia que se mueve con el gas en cualquier punto de la nube, las propiedades de emisión y absorción no dependen de  $\nu$  ni de  $\mu$ . Entonces, la función fuente  $S_{ij}$  es isotrópica y función sólo de la coordenada radial  $r$ .  $I(\nu_{ij}, T_c)$  es la intensidad de radiación procedente de una fuente central con temperatura efectiva  $T_c$ . Usualmente se simplifica por  $B(T_c)$  (cuerpo negro) o  $B(T_c)(1 - e^{-\tau_c})$  (cuerpo "gris").  $I(\nu_{ij}, T_{bg})$  es la intensidad a la frecuencia  $\nu_{ij}$  producida por el fondo de radiación microondas. Las funciones  $\beta(r)$  que aparecen en la EC. 2.40 son las *probabilidades de escape* cuya obtención completa puede encontrarse en Castor (1970). Su sentido físico es el siguiente:

- $\beta_{ij}(r) \equiv$  Probabilidad de que un fotón emitido en la transición  $ij$  en el punto de coordenada radial  $r$  escape de la región de acoplamiento sin interaccionar con las moléculas de la región.
- $\beta_{ij}^c(r) \equiv$  Probabilidad de que el fotón escape e incida sobre la fuente central.
- $\beta_{ij}^e(r) \equiv$  Probabilidad de que el fotón escape y escape al exterior.

Las probabilidades de escape se relacionan entre si mediante:  $\beta_{ij}(r) = \beta_{ij}^c(r) + \beta_{ij}^e(r)$  y se expresan mediante las relaciones:

$$\beta_{ij}^c(r) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{\mu_c} d\mu \frac{1 - \exp[-\tau_{ij}(r, \mu)]}{\tau_{ij}(r, \mu)} ; \quad \beta_{ij}^e(r) = \frac{1}{2} \int_{\mu_c}^{+1} d\mu \frac{1 - \exp[-\tau_{ij}(r, \mu)]}{\tau_{ij}(r, \mu)} \quad (2.41)$$

donde  $\mu_c = -\sqrt{1 - (r_c/r)^2}$  se obtiene al tomar  $p = r_c$  en  $\mu = -z/r$ . Finalmente,  $\tau_{ij}(r, \mu)$  es la opacidad total a lo largo de la trayectoria de parámetro de impacto  $p = r\sqrt{1 - \mu^2}$  a la frecuencia determinada por la velocidad  $v_z = -v(r)\mu$ . El elevado gradiente que se supone en el campo de velocidades hace que a esta opacidad sólo contribuya una pequeña región alrededor del punto de coordenadas  $(r, \mu)$ . La opacidad se escribe como (véase Castor 1970):

$$\tau_{ij}(r, \mu) = \frac{\tau_{ij}^0(r)}{1 + \mu^2 \left( \frac{d \ln v(r)}{d \ln r} - 1 \right)} \quad (2.42)$$

donde:

$$\tau_{ij}^0(r) = \frac{hc}{4\pi} \left( \frac{r}{v(r)} \right) (n_j(r)B_{ji} - n_i(r)B_{ij}) \quad (2.43)$$

y  $\frac{d \ln v(r)}{d \ln r}$  es la derivada logarítmica del campo de velocidades radial.

La distribución de los niveles moleculares es idéntica para todos los puntos de una capa de coordenada radial  $r$ . Sin embargo, cada punto de la capa contribuye de forma diferente a la intensidad de radiación observada (véase la FIG. 2.5). Por ejemplo, para campos de velocidad radial que cumplen  $\frac{d \ln v(r)}{d \ln r} > 1$ , el punto 2 ( $\mu = 1$ ) de la capa  $r$  tendrá una opacidad menor que en el punto 1 ( $\mu = 0$ ). La intensidad de una línea sobre el continuo correspondiente a la trayectoria de parámetro de impacto  $p$  y velocidad  $v_z$  es:

$$I_{ij}^L(v_z, p) = [S_{ij} - I(\nu_{ij}, T_{cont})][1 - \exp(-\tau_{ij}(v_z, p))] \quad (2.44)$$

donde  $T_{cont} = T_{bg}$  para  $p > r_c$  y  $T_{cont} = T_c$  para  $p < r_c$ .

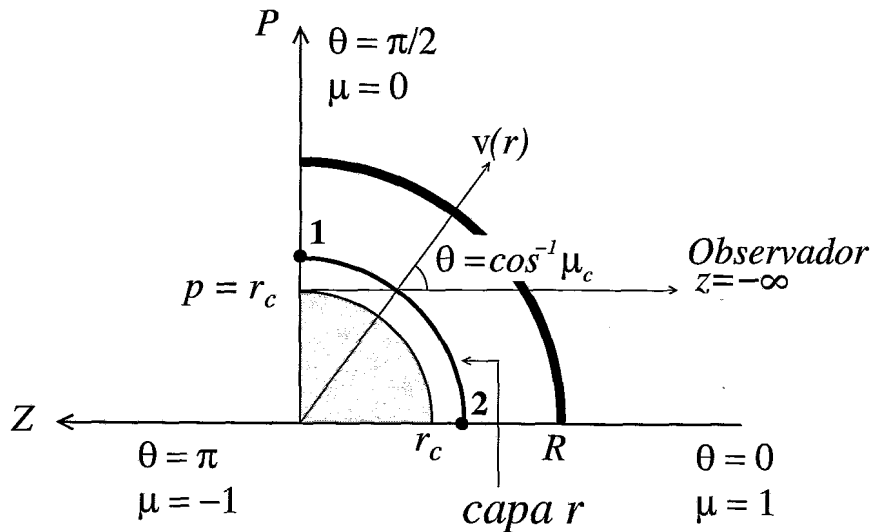


FIGURA 2.5: Esquema de la notación empleada en la aproximación LVG en simetría esférica.

Para poder comparar los resultados de los modelos LVG con las observaciones procedentes de ISO falta convolucionar esta intensidad con la respuesta de cada detector  $LWS_i$  e integrar en los diferentes parámetros de impacto en los que se ha discretizado la esfera:

$$I_{ij}^{obs}(v_z) = \int_0^R dp \, 2\pi p \, I_{ij}^L(v_z, p) \, P_{LWS, i}^n(p) \quad (2.45)$$

donde  $P_{LWS, i}^n$  es la respuesta normalizada a la unidad de cada detector  $i$  (vease la SEC. 2.4.2).

### VALIDEZ DE LA APROXIMACIÓN LVG

El desplazamiento Doppler ( $\nu$ ) de la frecuencia central de una línea molecular ( $\nu_{ij}$ ) debido al campo de velocidades  $v(r)$  puede expresarse como:

$$\nu = \nu_{ij} \left( 1 - \frac{v_z}{c} \right) \quad (2.46)$$

Si se obtiene la variación de  $\nu$  respecto a la coordenada  $z$  en la línea de mirada se tiene que:

$$\frac{\Delta\nu}{\Delta z} = \frac{\nu_{ij}}{c} \left| \frac{dv_z}{dz} \right| \quad (2.47)$$

donde  $dv_z/dz$  es el gradiente de velocidades en la línea de mirada. Para una línea molecular con perfil Doppler, el desplazamiento en velocidad es  $v_D = c \, \Delta\nu/\nu_{ij}$ , de tal forma que si se define la *distancia de Sobolev* ( $d_S$ ) como:

$$d_S = \frac{c}{\nu_{ij}} \frac{\Delta\nu}{\left| \frac{dv_z}{dz} \right|} \quad (2.48)$$

la EC. 2.47 puede escribirse como:

$$d_S = \frac{v_D}{\left| \frac{dv_z}{dz} \right|} \quad (2.49)$$

La aplicación correcta de la aproximación LVG se basa en que la distancia de Sobolev ( $d_S$ ) sea menor que la distancia típica en la región para la cual las condiciones físicas varían considerablemente y no se puede seguir asumiendo que las poblaciones de los niveles en las regiones acopladas radiativamente son idénticas. La relación 2.49 indica que cuanto más elevado sea el gradiente de velocidades, menor será  $d_S$  y mayor validez tendrá el método.

La aproximación LVG en simetría esférica es apropiada para el estudio de las envolturas circunestelares de estrellas evolucionadas tratadas en la segunda parte del trabajo. El método es especialmente válido para las regiones más internas de la envoltura (más sensibles a las observaciones en el IR-lejano) donde la elevada aceleración que experimentan gas y polvo posibilita el desacoplamiento radiativo de las diferentes regiones. En este caso, los efectos no-locales de la transferencia de radiación en la dirección radial son menores.

Para tener en cuenta el acoplamiento radiativo entre regiones con diferentes condiciones físicas y/o de excitación (caso de las nubes del medio interestelar), la transferencia de radiación tiene que ser tratada mediante técnicas no-locales más complejas que la aproximación LVG. En la siguiente sección se presenta brevemente la técnica empleada en este trabajo basada en los métodos numéricos de MonteCarlo.

## 2.4 MODELOS NO-LOCALES

En esta última sección se describen los modelos usados para tratar el problema no-local y no-lineal de la transferencia de radiación sin suponer ETL. El método empleado está basado en simulaciones MonteCarlo (MC) del campo de radiación en una nube con simetría esférica. En la SEC. 2.4.1 se expone el método MC propuesto originalmente por Bernes a finales de los años 70 y en la SEC. 2.4.2 se presentan las características principales del modelo MC mejorado que incluye los efectos del polvo y el recubrimiento entre diferentes líneas moleculares. Esta ha sido la técnica empleada en el análisis de la absorción producida por OH, H<sub>2</sub>O y C<sub>3</sub> en Sgr B2 que se discute en la primera parte de este trabajo.

### 2.4.1 APROXIMACIÓN MONTECARLO DE BERNES

En su aplicación a la transferencia de radiación en líneas moleculares, la técnica MC fue introducida por Bernes (1978 y 1979). Esta metodología ha resultado especialmente fructífera en la solución de la ETR aplicada al cálculo de la población de los niveles moleculares.

El método se basa en que los fotones de una línea espectral que emergen de la región considerada por unidad de tiempo son simulados por un conjunto de *fotones modelo*, siendo cada uno representativo de una fracción considerable de *fotones reales*. Los fotones modelos viajan a lo largo de la región hasta que escapan de la misma o hasta que su *peso* (número de fotones reales a los que representan), modificado por las absorciones que se producen en el medio, es despreciable.

Considerando el caso esféricamente simétrico, se discretiza la región en una serie de  $c$  capas concéntricas, cada una con condiciones físicas homogéneas ( $T_k$ ,  $n(\text{H}_2)$  y abundancia). La velocidad del gas ( $\mathbf{v}_{CM}$ ) puede variar en el interior de cada capa. El objetivo del método es resolver las ecuaciones de equilibrio estadístico en cada capa  $c$ , para lo que se requiere el conocimiento de la intensidad promedio  $\bar{J}_{ij}(c)$  en la capa. Ahora  $\bar{J}_{ij}(c)$  depende de la distribución de los niveles de energía de la molécula en otras capas de la región. Esta es la característica no-local que pretende simular el método MC y que no tiene en cuenta la aproximación LVG.

El tratamiento no-local de la radiación se consigue porque las emisiones (o absorciones) inducidas que causan los fotones modelo en cada capa pueden ser utilizadas en un proceso iterativo para recalcular las nuevas poblaciones de los niveles moleculares. El peso de los fotones modelo va siendo modificado continuamente para tener en cuenta las absorciones que ocurren a lo largo de la trayectoria que sigue el fotón. El proceso se repite hasta que las poblaciones en cada capa convergen. Repasamos con más detalle este proceso:

En un proceso similar al que siguen los fotones reales de cualquier fuente astronómica, los fotones modelo son emitidos mediante un generador de números aleatorios en puntos aleatorios de cada capa según direcciones  $\mathbf{k}$  aleatorias y con una desviación respecto a la frecuencia central de la transición  $\nu_{ij}$  (dada por  $\Delta\nu$ ) que sigue una *distribución de Doppler*. En cada capa  $c$  y transición molecular  $ij$  el número de fotones modelo  $N_{ij}^m(c)$  representa inicialmente a un número  $W_{ij}^0(c)$  de fotones reales  $N_{ij}^r(c)$  con:

$$W_{ij}^0(c) = \frac{N_{ij}^r(c)}{N_{ij}^m(c)} \quad (2.50)$$

La técnica MC permite que a la intensidad de radiación emergente puedan contribuir fotones procedentes de una fuente central de continuo con temperatura  $T_c$  y/o procedentes del fondo de radiación microondas con temperatura de cuerpo negro  $T_{bg}$ . Los fotones procedentes del continuo también son representados mediante fotones modelo emitidos desde puntos aleatorios, bien desde la superficie de la fuente central, bien desde la frontera externa de la región esférica. Estos fotones se emiten también según direcciones aleatorias pero con una distribución de frecuencias plana, propia de la emisión del continuo. La interacción radiativa entre las distintas capas de la región se consigue mediante el *seguimiento* de los fotones modelo en su recorrido. Debido a la simetría del problema, los fotones modelo sólo necesitan ser emitidos a lo largo de un eje radial (*p.ej.*, el eje- $Z$  de la FIG. 2.4). Considérese un fotón modelo  $f$  en la transición  $ij$  (donde  $E_i > E_j$ ) emitido aleatoriamente en el punto  $\mathbf{a}$  de la capa  $c$  según la dirección  $\mathbf{k}$  y con una desviación en frecuencias dada en unidades de velocidad por la EC. 2.11. La profundidad óptica a lo largo de la trayectoria  $s$  en la capa  $c$  es:

$$\tau_{ij}(\mathbf{a}, \mathbf{a} + s\mathbf{k}, v) = \frac{hc}{4\pi} [n_j(c)B_{ji} - n_i(c)B_{ij}] \phi(c, \mathbf{k}, v) \cdot s \quad (2.51)$$

cuya simplicidad se debe a que se asume redistribución completa en frecuencias. El peso inicial del fotón modelo va modificándose durante esta trayectoria debido a las absorciones y emisiones estimuladas provocadas en la capa. Después de recorrer cierta distancia, su peso será:

$$W_{ij}(s) = W_{ij}^0(c) \exp[-\tau_{ij}(\mathbf{a}, \mathbf{a} + s\mathbf{k}, v)] \quad (2.52)$$

El numero de emisiones inducidas que produce el fotón en su recorrido por la capa  $c$  desde  $s = 0$  a  $s = L$  por unidad de volumen y de densidad de partículas en el nivel  $i$  se escribe como:

$$N_{ij}^f(c) = \frac{hc}{4\pi} \frac{\phi(c, \mathbf{k}, v)}{V(c)} B_{ij} \int_0^L ds W_{ij}(s) \quad (2.53)$$

donde  $V(c)$  es el volumen de la capa  $c$ . Integrando esta expresión es fácil demostrar que el número de emisiones inducidas por el fotón  $f$  a lo largo de este primer recorrido  $N_{ij}^{f,1}(c)$  vale:

$$N_{ij}^{f,1}(c) = \frac{W_{ij}^0(c)}{V(c)} \frac{B_{ij}}{n_j(c)B_{ji} - n_i(c)B_{ij}} (1 - \exp[-\tau_{ij}(\mathbf{a}, \mathbf{a} + L\mathbf{k}, v)]) \quad (2.54)$$

donde la longitud  $L$  será lo suficientemente pequeña para que la velocidad del gas ( $\mathbf{v}_{CM}$ ) en esa región pueda considerarse uniforme. Una vez calculado  $N_{ij}^{f,1}(c)$  se actualiza el peso del fotón mediante la EC. 2.52 y se realiza un segundo recorrido en la dirección de  $\mathbf{k}$ . En cada recorrido  $r$  dentro de la capa  $c$ ,  $N_{ij}^{f,r}(c)$  (con  $r=1, \dots$ , número de recorridos realizados) se acumula en un contador total  $N_{ij}^T(c)$  independiente para cada capa y transición molecular dado por:

$$N_{ij}^T(c) = \sum_{f,r} N_{ij}^{f,r}(c) \quad (2.55)$$

Un fotón  $f$  procedente de la capa  $c$  puede pasar a otra capa (etiquetada como  $c'$ ) y producir emisiones estimuladas en  $c'$ . Estas nuevas emisiones se almacenan en otro contador  $N_{ij}^T(c')$ , logrando simular la interacción radiativa entre diferentes capas. El fotón  $f$  es seguido hasta que escapa de la región esférica total o hasta que su peso disminuye y se hace insignificante. Entonces se emite otro fotón modelo y se sigue su recorrido. Una vez emitidos y seguidos todos los fotones modelos, en cada contador  $N_{ij}^T(c)$  queda acumulado el número total de emisiones

inducidas en cada capa y transición. En general, la longitud de cada recorrido o paso del fotón será tal que en su recorrido atravesase varias capas. Sin embargo no podrá ser mayor que la distancia a la cual el coeficiente de absorción cambia apreciablemente debido al gradiente de velocidad del medio o debido a variaciones en la densidad.

Ahora se pueden determinar la distribución de poblaciones moleculares en cada capa. Para un sistema de dos niveles ( $E_i > E_j$ ), las ecuaciones de equilibrio estadístico son:

$$n_i [A_{ij} + B_{ij}\bar{J}_{ij} + C_{ij}] = n_j [B_{ji}\bar{J}_{ji} + C_{ji}] \quad ; \quad n_i + n_j = n_{tot} \quad (2.56)$$

Al final de la simulación en el método MC, cada contador  $N_{ij}^T(c)$  representa el número de emisiones inducidas por los fotones modelo en la capa  $c$ , emitidos en un segundo. Esta cantidad es equivalente al promedio en la capa  $c$  de  $B_{ij}\bar{J}_{ij}(c)$ . Esto permite determinar las poblaciones en cada capa resolviendo el sistema equivalente:

$$n_i(c) [A_{ij} + N_{ij}^T(c) + C_{ij}(c)] = n_j(c) \left[ \frac{g_i}{g_j} N_{ij}^T(c) + C_{ji}(c) \right] \quad ; \quad n_i(c) + n_j(c) = n_{tot}(c) \quad (2.57)$$

donde se ha tenido en cuenta que  $B_{ji}\bar{J}_{ji} = \frac{g_i}{g_j} B_{ij}\bar{J}_{ij}$ . Una vez obtenida una primera solución a la distribución de poblaciones, se comienza una nueva serie de emisiones de fotones modelo y el proceso anteriormente descrito se repite iterativamente hasta que se encuentra una solución convergente a la EC. 2.57 en cada capa. Una vez obtenida la convergencia, el cálculo del espectro emergente (mediante trazado parámetros de impacto) es relativamente sencillo puesto que la función fuente ahora se considera conocida en cada capa.

## APLICACIÓN AL CASO DE VARIOS NIVELES

La adaptación del método MC al caso de  $nm$  niveles moleculares utilizando pesos y contadores particularizados para cada transición molecular es sencilla. El sistema de ECS. 2.57 para determinar las poblaciones  $n_i$  ( $i = 1, \dots, nm$ ) puede escribirse en forma matricial como:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ a_{12} & -a_2 & \dots & a_{nm,2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1,nm} & \dots & a_{nm-1,nm} & -a_{nm,nm} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ \vdots \\ n_{nm} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_{tot} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.58)$$

donde  $a_{ij} = R_{ij} + C_{ij}$  y  $a_{ii} = \sum_{j \neq i}^{nm} a_{ij}$ . Este sistema de ecuaciones debe ser planteado para cada capa  $c$  en las que se discretiza la región. Con  $nc$  capas habrá que resolver la ecuación matricial:

$$\mathcal{A}_{nc \times nc}[n] \cdot \mathcal{N}_{nc \times nm} = \mathcal{B}_{nc \times nm} \quad (2.59)$$

en la que  $\mathcal{A}$  es una matriz diagonal por bloques donde cada bloque es como el primer término de la ecuación 2.58,  $\mathcal{N}$  es una matriz que contiene las poblaciones de cada nivel en cada capa y  $\mathcal{B}$  es una matriz que contienen las poblaciones totales de la molécula en cada capa. El sistema de ecuaciones dado por la EC. 2.59 refleja expresamente que  $\mathcal{A}$  depende de las propias poblaciones contenidas en  $\mathcal{N}$ , siendo por lo tanto un problema no-lineal.

El método MC en la descripción original de Bernes utiliza iteraciones- $\Lambda$  para la resolución iterativa del problema. Partiendo de una estimación de las poblaciones moleculares en cada capa  $\mathcal{N}^{old}$  (la primera estimación puede obtenerse mediante un cálculo LVG). Entonces,

el sistema de ECS. 2.59 se linealiza mediante la evaluación de  $\mathcal{A}$  usando las poblaciones de la iteración anterior y si inversión permite la obtención de unas nuevas poblaciones  $\mathcal{N}^{new}$ . El esquema iterativo  $\mathcal{A}[\mathcal{N}^{old}] \cdot \mathcal{N}^{new} = \mathcal{B}$  se repite hasta que se alcanza una convergencia satisfactoria. Actualmente existen métodos numéricos que aceleran la iteración- $\Lambda$  conocidos como *ALI* (*Accelerated- $\Lambda$  Iteration*) y otras técnicas más avanzadas que reducen el tiempo de cómputo y aceleran la convergencia del proceso. Se puede comprobar que las propiedades de convergencia empleando la iteración- $\Lambda$  permite la resolución de problemas donde la opacidad de las líneas moleculares no sean excesivas ( $<100$  en el MC original de Bernes).

### LA NUBE DE BERNES

La nube de Bernes se trata de un cálculo para el CO propuesto por Bernes (1979) que se utiliza hoy en día como "test" para los nuevos modelos de transferencia de radiación. Consiste en una nube esférica y homogénea de radio  $R = 3 \times 10^{18}$  cm ( $\sim 1$ pc), temperatura cinética constante  $T_k=20$  K, densidad de hidrógeno molecular  $n(H_2)=2 \times 10^3$  y una velocidad de microturbulencia de  $1 \text{ km s}^{-1}$ . Se supone que la nube está implosionando con un campo de velocidad proporcional a la distancia al centro de la nube, de forma que en la frontera exterior vale  $-1 \text{ km s}^{-1}$ . La abundancia de CO en la nube es  $\chi(\text{CO})=5 \times 10^{-5}$ . El problema no incluye ninguna fuente central pero si tiene en cuenta el fondo de radiación microondas. Se consideran las colisiones de CO con  $H_2$  y He. Aunque existen versiones más modernas, se utilizan los coeficientes colisionales de Green & Thaddeus (1976) para poder comparar con la solución original. La FIG. 2.6 muestra los resultados que se obtiene con un código similar al de Bernes (1978). El problema de la transferencia de radiación se resuelve para los 6 primeros niveles rotacionales de CO. Los resultados muestran los perfiles de las líneas en función de la velocidad radial relativa a la velocidad del gas en el centro de la nube y las variaciones de la temperatura de excitación en función de la distancia al centro de la nube. Se puede comparar que la solución para las líneas de CO  $J=1-0$  y  $2-0$  es idéntica a la presentada por Bernes (1979).

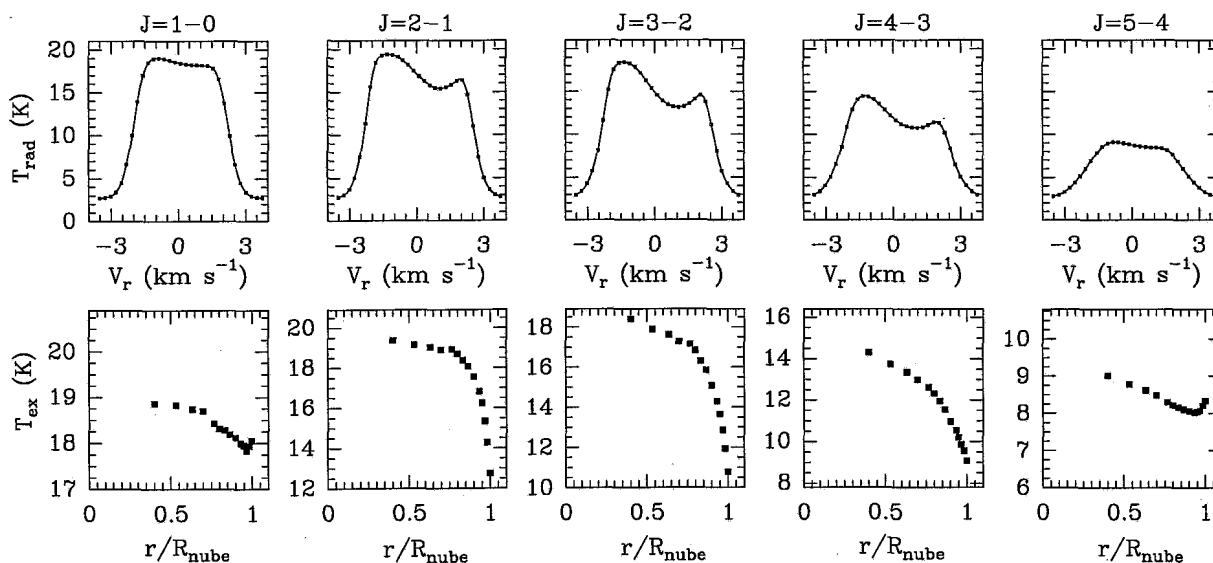


FIGURA 2.6: Perfiles y temperaturas de excitación de CO para el problema de la nube Bernes.



### 2.4.2 MONTECARLO MEJORADO: POLVO Y RECUBRIMIENTOS

Los modelos no-locales que se utilizan en este trabajo son una versión notablemente mejorada a la versión original de Bernes. Básicamente se añade la posibilidad de la presencia de líneas recubiertas y se tiene en cuenta la emisión y absorción producida por granos de polvo (véase la SEC. 2.1.3). Además se proporcionan algunas técnicas y variaciones numéricas para la reducción del ruido aleatorio presente en el MC. En su versión original desarrollada por González-Alfonso & Cernicharo (1993) fue aplicado con éxito a la explicación de las anomalías hiperfinas de HCN en nubes oscuras. En este trabajo se ha adaptado el código al estudio de líneas rovibracionales de C<sub>3</sub>, a las líneas rotacionales del vapor de agua y al tratamiento de las líneas rotacionales de OH desdobladas por la interacción-Λ.

### INCLUSIÓN DE LOS EFECTOS DEL POLVO Y RECUBRIMIENTOS

Teniendo en cuenta todo lo dicho en la sección anterior, se considera ahora un grupo  $g$  de transiciones moleculares recubiertas  $kl$  con frecuencia de referencia  $\nu_g$  (véase la SEC. 2.1.3) y un fotón modelo  $f$  emitido en el punto  $\mathbf{a}$  de la capa  $c$  en la transición  $ij$  (en la que transiciones  $kl$  se recubren) y frecuencia respecto a  $\nu_g$  dada en unidades de velocidad  $v$ . Después de recorrer cierta distancia a lo largo de la trayectoria  $s$  en la capa  $c$ , el peso inicial del fotón modelo  $W_{ij}^0(c)$  se modifica debido a todas las absorciones producidas por las transiciones del grupo  $g$ . De forma análoga a la EC. 2.52 podemos escribir:

$$W_{ij}(s) = W_{ij}^0(c) \exp[-\tau_g(\mathbf{a}, \mathbf{a} + s\mathbf{k}, v)] \quad (2.60)$$

donde  $\tau_g$  es la opacidad a lo largo de la trayectoria  $s$  en la capa  $c$  que viene dada por:

$$\tau_g(\mathbf{a}, \mathbf{a} + s\mathbf{k}, v) = \int_0^s ds' \alpha_{polvo,g}(\mathbf{a}, \mathbf{a} + s'\mathbf{k}, v) + \sum_{kl} \frac{hc}{4\pi} [n_l B_{lk} - n_k B_{kl}] \phi_{kl,g} \cdot s \quad (2.61)$$

donde  $\phi_{kl,g}$  es el perfil Doppler de la transición  $kl$  del grupo  $g$  (EC. 2.35) y  $\alpha_{polvo,g}$  es el coeficiente de absorción del polvo a la frecuencia  $\nu_g$ . El número de emisiones inducidas que produce el fotón modelo  $f$  en la transición  $kl$  ( $E_k > E_l$ ) del grupo  $g$  en el primer recorrido (entre  $s = 0$  y  $s = L$ ) en la capa  $c$  puede escribirse como:

$$N_{ij,kl}^{f,1}(c) = \frac{W_{ij}(c)}{V(c)} \frac{B_{kl}}{n_l(c)B_{lk} - n_k B_{kl}(c)} \frac{\tau_{kl,g}(\mathbf{a}, \mathbf{a} + L\mathbf{k}, v)}{\tau_g(\mathbf{a}, \mathbf{a} + L\mathbf{k}, v)} \cdot (1 - \exp[-\tau_g(\mathbf{a}, \mathbf{a} + L\mathbf{k}, v)]) \quad (2.62)$$

donde  $\tau_{kl,g}$  es la opacidad individual de la transición  $kl$ . Ahora, cada fotón modelo en  $ij$  puede producir absorción y emisión en todas las transiciones  $kl$  del grupo.

### INTERVALOS DE FRECUENCIA Y REDUCCIÓN DE RUIDO

El ruido numérico inherente a los métodos MC se debe a su naturaleza aleatoria. En el MC de Bernes, el ruido es producido por la asignación aleatoria de los puntos y ángulos en los que se emiten los fotones modelo, así como a su distribución en frecuencias. Para el problema del recubrimiento entre líneas, esta última variable es la mayor responsable del ruido.

Para simular correctamente el fenómeno de los recubrimientos se necesitaría que el ruido MC correspondiente a las alas de los perfiles de las líneas (principales responsables de los efectos de recubrimiento) sea muy bajo. En la metodología de Bernes se tendrían que emitir

un número demasiado elevado de fotones modelo. El método utilizado en este trabajo resuelve el problema dividiendo cada línea en  $n$  diferentes subintervalos de frecuencia (desarrollado por González-Alfonso & Cernicharo 1993). Por tanto, cada fotón modelo representa a los fotones reales de cada subintervalo, en vez de representar a los fotones emitidos en todo el perfil de la línea. Las frecuencias de los nuevos fotones modelo en vez estar determinadas de formas aleatoria, se distribuyen alrededor de la frecuencia central de los  $n$  subintervalos considerados. Además de mejorar la simulación del perfil total, el ruido MC asociado a la asignación aleatoria de las frecuencias desaparece.

Sea el número de fotones reales emitidos en la capa  $c$  en un segundo:

$$N_{ij}^r(c) = n_i(c) A_{ij} V(c) \quad (2.63)$$

donde  $A_{ij}$  es el coeficiente de Eistein de emisión espontánea,  $n_i$  la población del nivel en la capa  $c$  por unidad de volumen y  $V(c)$  es el volumen de dicha capa. Entonces, para un fotón modelo emitido en el punto  $\mathbf{a}$  de la capa según la dirección  $\mathbf{k}$ , su peso inicial  $W_{ij,n}^0(c)$  correspondiente al intervalo  $n$  de la transición  $ij$  será:

$$W_{ij,n}^0(c) = W_{ij}^0(c) \int_{v_n^-}^{v_n^+} dv \phi(\mathbf{a}, \mathbf{k}, v) = \frac{n_i(c) A_{ij} V(c)}{N_{ij}^m(c)} \int_{v_n^-}^{v_n^+} dv \phi(\mathbf{a}, \mathbf{k}, v) \quad (2.64)$$

donde  $v_n^-$  y  $v_n^+$  (en  $\text{km s}^{-1}$ ) son los límites superior e inferior del subintervalo  $n$  correspondiente y  $N_{ij}^m$  es el número de fotones modelo emitidos en la capa  $c$ .

Los fotones del continuo (procedentes de la fuente central o del fondo de radiación microondas) también son tratados de forma diferente al MC original de Bernes. Ahora se emiten uniformemente en intervalos de frecuencia (de valor  $\Delta v_g$  alrededor de la velocidad de referencia del grupo  $v_g$ ) tal que su emisión cubre todas las líneas  $kl$  del grupo y la dispersión en velocidades de las moléculas en la región. Tras esta modificación, el ruido MC sólo es debido a la asignación aleatoria de los puntos y ángulos de emisión de los fotones modelo. La versión mejorada del MC utilizada también elimina estas fuentes de ruido. Para ello se determinan numéricamente (y no de forma aleatoria) un conjunto discreto de ángulos y radios de emisión en cada capa  $c$ , cuyos valores relativos simulan las distribuciones aleatorias de los fotones modelo anteriores. El ruido MC original es sustituido por los errores sistemáticos que pueden aparecer si los valores numéricos son poco representativos. Resumiendo, aunque la simulación del campo de radiación por medio de fotones modelo se sigue manteniendo, los fotones son ahora emitidos en determinados puntos, ángulos e intervalos de frecuencia.

## RESPUESTA DEL TELESCOPIO A LA RADIACIÓN

Sólo las intensidades de radiación en una determinada transición molecular, calculadas a partir de los modelos de transferencia de radiación y convolucionadas con el haz del telescopio pueden ser comparadas con los datos observacionales. El problema del acoplamiento de la radiación procedente de una fuente astronómica con la respuesta del telescopio es crucial para la correcta interpretación de las observaciones. La respuesta del telescopio espacial ISO (instrumento LWS) a la radiación IR que incide sobre él con un ángulo  $\varphi$  respecto a la dirección determinada por su eje viene dada por un diagrama de difracción (*anillos de Airy*).

La resolución angular puede caracterizarse mediante la *anchura a media potencia*  $\theta_{LWS,i}$  de la *función respuesta* del instrumento (donde  $i=0,\dots,9$  son los diferentes detectores del LWS). Puesto que el *haz principal* del LWS se aproxima bien mediante una gaussiana (vease Gry *et al.* 2002), el ángulo sólido subtendido por el LWS viene dado por (véase la TABLA 1.2):

$$\Omega_{LWS,i} = \frac{\pi}{4 \ln 2} \theta_{LWS,i}^2 \quad (2.65)$$

Los detectores del LWS miden la intensidad específica observada  $I_{LWS}^{obs}$  que es la convolución de la intensidad específica procedente de la fuente con la respuesta de cada detector:

$$I_{LWS}^{obs}(\mathbf{k}_0, \nu) = \int d\Omega I(\mathbf{r}, \mathbf{k}, \nu) P_{LWS,i}^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) \quad (2.66)$$

donde  $P_{LWS,i}^n$  es la respuesta normalizada a la unidad de cada detector  $i$  a la radiación incidente en la dirección dada por  $\mathbf{k}$  cuando el eje del detector está orientado según la dirección de  $\mathbf{k}_0$ . El superíndice  $n$  indica que  $P_{LWS,i}^n$  está normalizada de forma que su máximo en la dirección del eje del LWS es 1. La función respuesta es el resultado de la convolución de la *Point Spread Function* (PSF) y el perfil instrumental de cada detector LWS. Por definición se asume que los perfiles instrumentales son rectangulares. Idealmente la PSF es un disco de Airy (imagen de difracción circular), sin embargo, existen fenómenos secundarios e imperfecciones ópticas que redistribuyen la potencia total del centro del perfil a los anillos de Airy secundarios. La calibración de las observaciones procedentes de ISO incluyen estos fenómenos (Gry *et al.* 2002).

Debido a las dimensiones del *haz* de los detectores LWS ( $\sim 80''$ ), el menor tamaño angular de las fuentes observadas ( $\Omega_F$ ) hace que el factor de dilución ( $\Omega_F/\Omega_{LWS,i}$ ) sea pequeño y que las intensidades de radiación  $I_{ij}^{mod}$  calculadas de los modelos y convolucionadas con  $P_{LWS,i}^n$  sean una medida adecuada para compararlas con las  $I_{LWS}^{obs}$  observadas.

## PARTE I.

NUBES INTERESTELARES: LA REGIÓN DE SGR B2

## Capítulo 3

# El Centro Galáctico y Sgr B2

En este capítulo se da un repaso general a las características fundamentales del ISM en los 500 pc centrales de la Galaxia. Quizás, en un abuso del lenguaje nos referiremos a esta región como el *Centro Galáctico* (CG). Las especiales propiedades del CG en comparación con las del disco de la Galaxia (DG) influyen decisivamente tanto en la distribución de la materia como en la formación estelar y mecanismos de calentamiento del gas. La mayoría de estas características parecen estar determinadas por la respuesta del material nuclear a un potencial de tipo barrado. Sin embargo, aún se está lejos de tener un conocimiento completo del CG, y no existe un modelo único para la interpretación de las observaciones astronómicas en nuevas ventanas espectrales (infrarrojo, rayos-X, rayos- $\gamma$ , etc.). Dado que es el único núcleo galáctico observable con suficiente resolución espacial, el CG juega también un destacado papel para la astronomía extragaláctica, constituyendo un excelente escenario donde contrastar las diferentes teorías existentes sobre las regiones nucleares de una Galaxia.

De forma particular, aquí se tratará la región de formación estelar *Sgr B2*, la nube molecular más masiva de la Galaxia. Esta extensa región, situada a unos 100 pc del centro dinámico de la Galaxia proporciona uno de los laboratorios astrofísicos más importantes para el estudio de las regiones de formación de estrellas masivas y el comportamiento del gas neutro e ionizado en el núcleo de una galaxia. Como se verá más adelante, sus diversas componentes y características geométricas, físicas y químicas, la convierten también en un paradigma para la comprensión global del CG. En cierta manera, Sgr B2 es como un núcleo galáctico en *miniatura*, con una gran envoltura de gas molecular sometida a condiciones parecidas a las del resto de la población de nubes moleculares del CG. Sin embargo, las propiedades a gran escala de esta componente han sido aún poco estudiadas. Este será el objetivo de los siguientes dos capítulos.

### 3.1 CARACTERÍSTICAS del CENTRO GALÁCTICO

Cualquiera que sea su tipo morfológico, los núcleos de las galaxias albergan en su interior multitud de espectaculares fenómenos y objetos únicos que son determinantes para la comprensión de la evolución galáctica. A pesar de la relativa proximidad del CG en comparación con la distancia a los núcleos extragalácticos más cercanos, la cantidad de polvo existente en la línea de mirada dificulta notablemente las observaciones desde el IR-cercano hasta los rayos-X blandos. El IR y en particular la espectroscopia en el IR-lejano, ha sido la ventana menos explorada hasta la fecha. Sin embargo, este rango espectral está especialmente adaptado al estudio simultáneo del gas neutro e ionizado y del polvo en objetos oscurecidos como el CG.

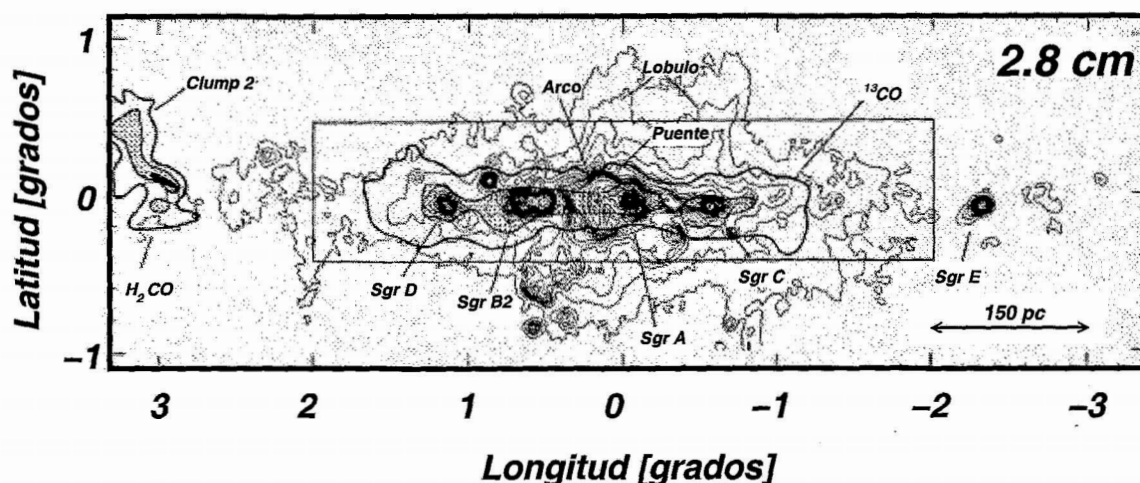


FIGURA 3.1: Emisión molecular (contornos gruesos) en  $^{13}\text{CO}$  y  $\text{H}_2\text{CO}$  (sólo en el Clump 2) y radiocontinuo (contornos delgados) a 2.8 cm. También se muestra la localización de los principales complejos de la ZMC (adaptada de Güsten 1989).

### 3.1.1 LOS 500 pc CENTRALES DE LA GALAXIA

El gas neutro en los  $\sim 2$  kpc centrales de la Galaxia está dominado por una estructura en forma de disco, usualmente denominada *disco nuclear HI* (por ser más prominente en la línea a 21 cm de HI). Se piensa que ciertos procesos disipativos conducen a una fuerte concentración de gas en una región de unos 500 pc de tamaño alrededor de la radio fuente Sgr A\*, cuya posición coincide con el centro dinámico de Galaxia (de aquí en adelante el *centro* de la Galaxia). Existe un consenso mayoritario en que su interior alberga un agujero negro supermasivo  $\sim 4 \times 10^6 M_\odot$  (Eckart & Genzel 1997; Schödel *et al.* 2002). Las características fundamentales que hacen del CG un lugar extremadamente interesante en comparación con el DG son: las fuertes fuerzas de marea y cizalladura existentes; la elevada metalicidad e inusuales abundancias moleculares; los fuertes campos magnéticos; las altas temperaturas, densidades, presiones y turbulencia del gas; y los diferentes mecanismos de formación estelar (Güsten 1989; Morris & Serabyn 1996).

A pesar de su importancia para determinar las posiciones y dimensiones de los objetos pertenecientes al CG, su distancia al Sol no se conoce con exactitud. Esto se debe a que las diferentes técnicas empleadas en su determinación dan resultados diferentes (véase Reid 1993 para una discusión de las diferentes estimaciones). En este trabajo se utiliza la distancia recomendada por la IAU de 8.5 kpc (Kerr & Lynden-Bell 1986) en la que  $24''$  equivalen a 1 pc.

Dentro del *disco nuclear HI* y con un radio de unos 250 pc existe una región más compacta, donde la concentración y densidad de gas molecular incrementa considerablemente respecto a cualquier otro lugar de la Galaxia. Morris & Serabyn denominan a esta componente como la *Zona Molecular Central* (ZMC). Aunque representa sólo un  $\sim 0.1\%$  del volumen total de la Galaxia, la ZMC acumula en su interior un  $\sim 10\%$  de su contenido molecular (en masa  $\sim 10^8 M_\odot$ ). Además, produce un 5–10 % de la luminosidad en forma de continuo en el IR y de

fotones Lyman (Mezger 1978; Cox & Laureijs 1989). Los mapas de la emisión del continuo en la ZMC muestran un medio altamente fragmentado y numeroso en condensaciones, dominado por grandes complejos moleculares (Sgr A, B, C, ...), fuentes de emisión de radiocontinuo, nubes filamentosas, remanentes de supernovas y estructuras en forma de burbujas en expansión (*p.ej.*, Odenwald & Fazio 1984; Lis & Carlstrom 1994; Pierce-Price *et al.* 2000).

En la FIG. 3.1 se muestra un mapa del gas molecular trazado por la emisión 1-0  $^{13}\text{CO}$  (Heiligman 1987) superpuesto sobre el continuo a 2.8 cm de la ZMC (Handa *et al.* 1987). En la figura aparecen señalados los complejos moleculares más significativos de la región. En general, la mayoría de las grandes condensaciones moleculares coinciden con las regiones más importantes de emisión a longitudes de onda radio. En la FIG. 3.2 se muestra otro mapa de la ZMC para la distribución en velocidades de la emisión  $^{13}\text{CO}$  en cada longitud galáctica (Bally *et al.* 1988). De estos dos mapas se desprende que la distribución del gas en la ZMC es altamente asimétrica, estando la mayoría de la masa localizada a longitudes y velocidades positivas. Debido a nuestra poco ventajosa situación en el plano galáctico, la posición geométrica real de las componentes del CG y la dinámica del gas sigue siendo bastante ambigua.

### PRINCIPALES COMPONENTES Y ESTRUCTURAS DEL CG

A partir de la cinemática del gas molecular es posible dividir el gas asociado al CG en dos componentes bien diferenciadas. La primera, con un radio de  $\sim 180$  pc, marca la frontera exterior de la región y está formada por gas a alta velocidad ( $130\text{--}200\text{ km s}^{-1}$ ) con forma de anillo en expansión. Los arcos a  $+135\text{ km s}^{-1}$  y  $-150\text{ km s}^{-1}$  se corresponden con las regiones de velocidad positiva y negativa del denominado *anillo molecular a 180 pc*. En su interior se encuentra la segunda componente de menor velocidad ( $\leq 100\text{ km s}^{-1}$ ) formada por nubes moleculares gigantes y un medio difuso a gran escala. Entre las principales estructuras destacan:

- Las *asociaciones OB* jóvenes *Sgr A-E* caracterizadas por su intensa emisión en el continuo desde el IR hasta longitudes de onda radio y por su “profusión” en líneas moleculares. Estas condensaciones son regiones de activa formación estelar. En particular, *Sgr B2* contiene un intenso brote de formación de estrellas masivas en su interior.
- El *Arco polar*, prominente región de emisión de radiocontinuo perpendicular al plano galáctico y que aparentemente conecta con *Sgr A* mediante una estructura formada por filamentos arqueados conocida como el *Puente*. Recientemente se han encontrado en esta región dos cúmulos de estrellas compactos y muy masivos (ver FIG. 3.4) denominados *Los Arcos* y *El Quintuplete* formados por estrellas *OB* de hasta  $120 M_{\odot}$  (Figer *et al.* 1999). En el interior de regiones como *Sgr B2* se están formando agrupaciones de este tipo.
- La *Cresta de polvo*, estrecha banda de polvo formada por varias condensaciones moleculares sin fuentes compactas radio o IR asociadas, que parece unir la región del *Arco* con la de *Sgr B*. A pesar de su elevado contenido molecular en masa y densidad, no hay evidencias de que exista formación estelar masiva en su interior. En este sentido, constituyen una población de nubes del CG diferente a las regiones de formación estelar en *Sgr A-E*.
- El *Clump2*, aunque situado a longitudes galácticas superiores a las asociadas con la ZMC, comparte las características principales de las nubes del CG y se incluye dentro de él.

### 3.1.2 POTENCIAL BARRADO Y DINÁMICA DEL GAS

La proyección  $(l,v)$  de la FIG. 3.2 muestra que la cinemática del gas neutro en el CG tiene una distribución altamente asimétrica, existiendo gas con velocidades radiales prohibidas para un movimiento circular ordenado ( $v$  con signo diferente al de  $l$ ). Tanto la cinemática del gas como la distribución del brillo superficial sugiere que el potencial en el CG es de tipo *barrado* y no de ejes simétricos (Binney *et al.* 1991). La principal diferencia respecto a un potencial gravitatorio esférico estriba en que las órbitas estables cerradas que sigue el gas pueden ahora intersectarse a determinadas energías. Además, no existe una única familia de órbitas.

Es bien sabido que las barras de material en el centro de las galaxias causan fuertes concentraciones de gas en la vecindad del núcleo, especialmente cuando existen resonancias dinámicas. La intersección de varias órbitas provoca además el aumento de la tasa de colisión entre nubes moleculares pertenecientes a diferentes órbitas. Este fenómeno causa un aumento considerable de la formación estelar en las regiones de choque, usualmente separadas ligeramente ( $\sim 100$  pc) del centro de la Galaxia. Bajo un potencial esférico, la formación estelar de la región nuclear se concentra cerca del centro dinámico (Telesco *et al.* 1993). Por tanto, la respuesta del gas a un potencial barrado son las desviaciones del movimiento circular y la aparición de fuertes choques producidos por la intersección de órbitas. Además influye en los movimientos migratorios del gas hacia el núcleo central (Morris & Serabyn 1996).

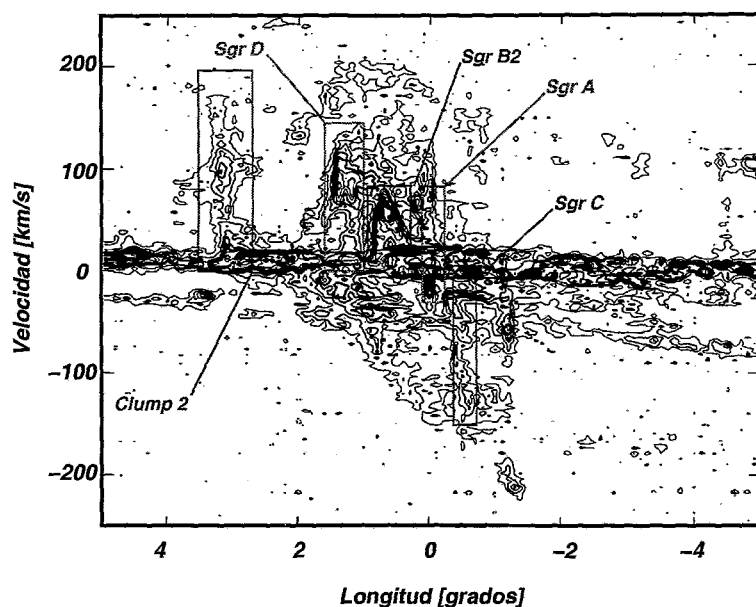


FIGURA 3.2: Diagrama de la distribución de velocidades de la emisión  $^{13}\text{CO}$  en función de la longitud galáctica para el rango  $-0^\circ.6 < b < +0^\circ.6$  (adaptada de Bally *et al.* 1988).

Binney *et al.* (1991) han calculado las órbitas resultantes para el caso particular del centro de nuestra Galaxia para una barra que forma  $\sim 16^\circ$  con la línea de mirada y que se extiende hasta el radio de corrotación a  $\sim 2.4$  kpc. Existen dos familias de órbitas diferentes ( $x_1$  y  $x_2$ ) que intersectan en la denominada *resonancia interna de Lindblad* (RIL). El gas asociado a la familia  $x_1$  rota entre la RIL y el radio de corrotación en órbitas elongadas entorno al eje mayor de la barra. En el diagrama  $(l,v)$  estas órbitas darían lugar a una estructura con forma



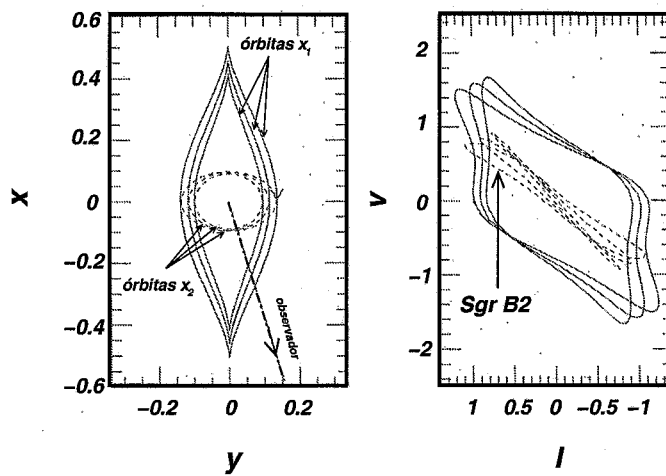


FIGURA 3.3: IZQUIERDA: órbitas  $x_2$  (líneas a trazos) y  $x_1$  intersectantes (línea continua) en un modelo de potencial barrado para el CG. La flecha indica la línea de mirada Sol-CG. DERECHA: Diagrama  $(l, v)$  correspondiente a esa línea de mirada y localización aproximada de la región de Sgr B2 (adaptada de Binney et al. 1991).

de paralelogramo (ver FIG. 3.3). Existe una última órbita estable  $x_1$  cerca de la RIL a partir de la cual las órbitas  $x_1$  intersectan entre sí, provocando colisiones entre el gas de las diferentes órbitas. Los choques resultantes causan pérdidas abruptas de energía y momento angular en el gas, haciendo que caiga a órbitas pertenecientes a la familia  $x_2$ . Este gas rota en órbitas casi circulares más internas alrededor del eje menor de la barra. En el diagrama  $(l, v)$  las órbitas  $x_2$  son líneas diagonales que pasan por el origen  $l=v=0$  (ver FIG. 3.3).

Según este modelo, el diagrama  $(l, v)$  observacional del CG (FIG. 3.2) muestra dos componentes cinemáticas. Por un lado, una componente molecular en trayectorias  $x_1$  con energías iguales o inferiores a la última órbita  $x_1$  no intersectante. El anillo molecular a 180 pc, asociado inicialmente con un anillo en expansión radial (p.ej., Scoville 1975), pertenecería a la órbita  $x_1$  estable más interna. También en órbitas  $x_1$ , existiría una población de nubes poco densas con velocidades no circulares responsables igualmente de la estructura con forma de paralelogramo. Por otro lado, el  $\sim 85\%$  en masa de la ZMC estaría localizada en órbitas  $x_2$  aproximadamente circulares y serían las responsables de las estructuras diagonales en el diagrama  $(l, v)$ .

Este modelo propone que la formación de grandes nubes moleculares en el CG está asociada a la coalescencia producida por el aumento de colisiones nube-nube en la intersección de las órbitas del potencial barrado. La compresión del gas en las fronteras de las nubes provocaría un aumento significativo de la formación estelar en las regiones chocadas (cercanías de la RIL). En particular, se propone que Sgr C es la contrapartida a longitudes negativas de Sgr B2. Estos dos complejos son las regiones más sobresalientes en formación estelar de la ZMC. Además su distancia proyectada al centro de la Galaxia ( $\sim 75$  y  $\sim 100$  pc respectivamente) es consistente con la RIL calculada para el CG. Es decir, la barra podría explicar tanto la localización de Sgr B2 y Sgr C como su intensa formación estelar (Lis & Carlstrom 1994). Sin embargo, este modelo de barra pura (modo  $m=2$ ) no explica toda la asimetría de la distribución de gas observada en la ZMC. Se piensa que también podrían existir inestabilidades gravitatorias del tipo  $m=1$  producidas, por ejemplo, por la presencia de una segunda barra de menores dimensiones.

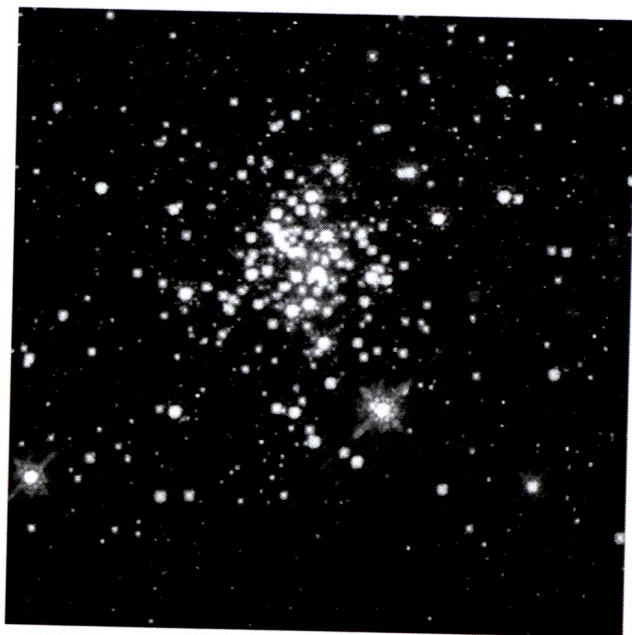


FIGURA 3.4: *Cúmulo los Arcos con HST/NICMOS. En su interior se encuentran muchas de las estrellas más masivas y brillantes de la Galaxia (tomada de Figer et al. 1999).*

### 3.1.3 PROPIEDADES GLOBALES DEL ISM EN EL CG

En comparación con el DG, la región central de nuestra Galaxia aparece como un sistema aparentemente más evolucionado (TABLA 3.1). La proporción en masa de estrellas respecto al gas disponible para formarlas es un orden de magnitud superior en el CG y decrece a medida que nos alejamos del núcleo. Además, la fracción que reside en forma de gas interestelar es predominantemente molecular aunque con abundancias moleculares que difieren considerablemente de las del resto de la Galaxia. Esto se refleja en un enriquecimiento de isótopos y elementos secundarios del grupo CNO (*p.ej.*,  $^{13}\text{C}$  y  $^{18}\text{O}$ ) generados a través de la evolución estelar y eyectados al medio por estrellas de los últimos tipos espectrales (Wannier 1989). Por último, la tasa de formación estelar de las nubes del CG en su conjunto, es un orden de magnitud menor que en las regiones de formación del disco (Güsten 1989). Pese a la disminución de la fracción de gas respecto al contenido estelar, el CG contiene algunas de las nubes moleculares más masivas de la Galaxia, algunas de ellas (como Sgr B2) con intensa formación de estrellas masivas y tasas similares a las de los grandes complejos de formación estelar del DG.

Debido a los factores ambientales propios del CG, las propiedades físicas y químicas de las nubes moleculares difieren notablemente de aquellas del resto de la Galaxia (ver TABLA 3.2). Como norma general, las nubes de la ZMC se distinguen por tener (Morris & Serabyn 1996):

- Elevada densidad ( $n(\text{H}_2) \geq 10^4 \text{ cm}^{-3}$ ).
- Elevada turbulencia ( $\Delta v = 15 - 50 \text{ km s}^{-1}$ ).
- Gas molecular caliente ( $T_k = 30 - 200 \text{ K}$ ).
- Polvo relativamente frío ( $T_{\text{polvo}} \simeq 20 - 30 \text{ K}$ ).

TABLA 3.1: Características promedio del disco de la Galaxia y del CG.

	Disco Galáctico	Centro Galáctico
Gas atómico [ $M_{\odot}$ ]	$10^9$	$10^7$
Gas molecular [ $M_{\odot}$ ]	$10^{8.9}$	$10^8$
Componente estelar [ $M_{\odot}$ ]	$10^{11.0}$	$10^{9.6}$
Fracción $H_2/HI$	0.5	20
Fracción $M_{\star}/M_{gas}$	15	100
Densidad promedio [ $cm^{-3}$ ]	1–2	100
Densidad superficial [ $M_{\odot}pc^{-2}$ ]	5	100
Flujo de fotones Lyman [ $s^{-1}$ ]	$10^{53.3}$	$10^{52.3}$
Tasa formación estelar [ $M_{\odot}año^{-1}$ ]	5.5	0.3–0.6
Luminosidad IR [ $L_{\odot}$ ]	$10^{10.0}$	$10^{9.1}$
$^{13}C/^{12}C$	1/75	1/25
$^{18}O/^{16}O$	1/500	1/250
$^{15}N/^{14}N$	1/400	1/1000

Tabla adaptada de Güsten 1989, Wannier 1989 y Mezger et al. 1996.

## LA DENSIDAD DEL GAS

Los mapas del CG que cartografían la emisión de moléculas de alto momento dipolar muestran que el gas molecular denso ( $n(H_2) \geq 10^4 cm^{-3}$ ) tiene una distribución extensa en toda la ZMC (CS: Bally et al. 1987;  $H_2CO$ : Zylka et al. 1992; SiO: Martín-Pintado et al. 1997). Los picos de densidad del CG se sitúan en los complejos moleculares  $l=1.5^\circ$ , Sgr A, Sgr B2 y Sgr C.

La alta densidad de estas nubes puede explicarse como condición necesaria para sobrevivir a la intensas fuerzas de marea a las que están sometidas dada su posición en el potencial barrado del CG. Se puede demostrar que cualquier nube gravitacionalmente ligada deberá tener una densidad mínima dada por (Güsten 1989):

$$n(H_2)_{nube} \geq 10^4 \left( \frac{75 pc}{R_{gc}} \right)^{1.8} [cm^{-3}] \quad (3.1)$$

donde  $R_{gc}$  es el radio galactocéntrico en el que se sitúa la nube y el exponente en  $R_{gc}^{-1.8}$  es la dependencia radial propuesta por Becklin & Neugebauer (1968). En caso contrario, la nube molecular se fragmentará en forma de gas difuso de baja densidad. Este criterio de estabilidad gravitatoria hace que las nubes del CG sean más densas que las del DG. Estas densidades son suficientemente elevadas para provocar la excitación colisional de las moléculas de alto momento dipolar observadas en toda la región central de la Galaxia. La intensidad integrada de la emisión de este tipo de moléculas en el DG es un factor 10 menor. Para el caso particular de las extensas *envolturas* de las nubes moleculares del CG, su menor densidad puede causar que las fuerzas de marea provocadas por el potencial barrado sí consigan arrastrar grandes cantidades de gas.

## LA TURBULENCIA DEL GAS

La anchura de las líneas moleculares observadas en el CG ( $\Delta v = 15 - 50 km s^{-1}$ ) es aproximadamente un orden de magnitud mayor que la observada en nubes moleculares del DG.

Estas dispersiones de velocidad son altamente supersónicas (la velocidad del sonido en un gas de  $H_2$  a  $T_k=50$  K es de  $\sim 1.5 \text{ km s}^{-1}$ ) y la escala de tiempo para su disipación es de unos  $10^6$  años. Además, si en el *haz* del telescopio están presentes varias nubes situadas en la línea de mirada hacia el CG, se pueden observar anchuras de línea de hasta  $\Delta v \simeq 100 \text{ km s}^{-1}$ .

Suponiendo que las nubes moleculares del CG están virializadas se demuestra que la dispersión de velocidades en su interior aumenta con la densidad del gas y con las dimensiones de la nube. Tomando en cuenta la expresión para la densidad dada por la EC. 3.1, resulta:

$$\Delta v_{nube} \simeq 17 \left( \frac{R_{nube}}{10 \text{ pc}} \right) \left( \frac{150 \text{ pc}}{R_{gc}} \right)^{0.9} [\text{km s}^{-1}] \quad (3.2)$$

donde  $R_{nube}$  es el radio de la nube (en pc). La elevada anchura de las líneas en el CG puede ser también consecuencia de la posición de las nubes del CG en el potencial gravitatorio central.

## LOS MECANISMOS DE CALENTAMIENTO DEL GAS

La presencia de una componente extensa de gas neutro con temperaturas promedio en el rango  $T_k=30\text{--}200$  K (*p.ej.*, Hüttemeister *et al.* 1993b; Rodríguez-Fernández *et al.* 2001) coexistiendo con polvo frío a  $T_{polvo} \simeq 20\text{--}30$  K (Odenwald & Fazio 1984; Cox & Laureijs 1989) excluyen a las colisiones gas-polvo caliente como mecanismo de calentamiento dominante. Este mecanismo es habitual en las regiones de formación estelar donde el polvo es calentado eficientemente por el campo de radiación UV procedente de las estrellas recién formadas. En el CG se necesitan claramente otros mecanismos de calentamiento a gran escala que actúen selectivamente sobre el gas neutro de la ZMC (ver la SEC. 3.2.4 para el caso de Sgr B2).

Tradicionalmente se ha intentado explicar conjuntamente tanto las anchuras de las líneas espectrales, las diferencias de temperatura entre el gas y el polvo, y las elevadas abundancias de elementos refractarios (Si, Fe, etc.) en un escenario dominado por mecanismos mecánicos como los choques de baja velocidad y la disipación de la turbulencia (*p.ej.*, Wilson *et al.* 1982; Martín-Pintado *et al.* 1997). Debido a estas mismas características y a la ausencia de líneas de recombinación y/o emisión de radiocontinuo en multitud de regiones donde se observa gas caliente, los posibles efectos de la radiación UV en el calentamiento no han sido tenidos en cuenta convenientemente. En este trabajo se explotará la herramienta que proporciona la observación de líneas de estructura fina de átomos e iones en el IR-lejano para analizar estos efectos.

## FORMACIÓN ESTELAR EN EL CG

En lo referente al contenido estelar de la ZMC, el CG se caracteriza por ser un sistema más evolucionado que el DG. Los objetos que más contribuyen a la masa estelar son estrellas de baja masa en SP ( $>90\%$ ) que sólo aportan el  $\sim 6\%$  de la luminosidad en el IR-cercano. Esta luminosidad está dominada por estrellas evolucionadas ( $\sim 88\%$ ), cuya contribución al contenido estelar total en masa es prácticamente despreciable (Mezger *et al.* 1996). En particular se piensa que la abundancia de gigantes M y K es suficiente para calentar el polvo extenso de la ZMC hasta las temperaturas observadas (Cox & Laureijs 1989). Simultáneamente, el CG contiene una fracción más elevada de estrellas masivas ( $>100 M_\odot$ ) que el DG. De hecho, se ha propuesto que los mecanismos de formación estelar en el CG favorecen de alguna manera la formación de este tipo de estrellas muy masivas (*p.ej.*, Morris 1993; Morris & Serabyn 1996).



Las observaciones del continuo en el IR-lejano y en radio sugieren que gran parte de la población estelar del CG surgió en un brote de formación estelar hace unos  $10^7$  años. Sin embargo, actualmente la tasa de formación estelar en el CG es notablemente baja, un orden de magnitud inferior a la del DG (ver TABLA 3.1). Pese a que existen algunas regiones con intensa formación estelar (como las condensaciones en Sgr B2), la ausencia de radiocontinuo en multitud de nubes moleculares sugiere que la mayoría de nubes no están formando actualmente estrellas más tempranas que el tipo O7.5 (Odenwald & Fazio, 1984).

Obviamente, las particulares condiciones ambientales del CG presentadas en las secciones anteriores (densidad del gas, metalicidad, turbulencia, fuerzas de marea, etc.) difieren drásticamente de aquellas en cualquier otro lugar de la Galaxia y debe influir decisivamente en los mecanismos de formación estelar de la ZMC. Sin embargo, no es sencillo cuantificar individualmente cada uno de estos fenómenos. Sólo recientemente se ha conseguido determinar por primera vez la función inicial de masa (IMF) para una población estelar del CG. El análisis de los cúmulos de *Los Arcos* (FIG. 3.4) y *El Quintuplete* muestra que la pendiente IMF en esas dos poblaciones es más plana que la que se deriva en el DG, lo cual indica que efectivamente se favorece la formación de estrellas masivas (Figer *et al.* 1999, Najarro 2000).

La elevada dispersión en velocidades del gas en el CG provoca que la masa de Jeans ( $\sim 10^5$ – $10^7 M_\odot$ ) sea sustancialmente mayor que en el DG. Esto indica que la formación estelar en el CG no puede estar dominada por el colapso gravitatorio de las nubes moleculares salvo casualmente en condensaciones extremadamente masivas y densas. Incluso en Sgr B2 (la nube más masiva del CG y con núcleos muy densos) se piensa que la formación estelar se debe a la compresión del gas provocada por la colisión de dos nubes moleculares (véase la SEC. 3.2.4). Es decir, a pesar de que las condiciones físicas dificultan la formación estelar en el CG, se sabe que en determinadas posiciones (Sgr B2 y Sgr C básicamente) sí se están formando estrellas. Existe el convencimiento de que la formación estelar en el CG está dominada por eventos externos a las propias nubes moleculares. Tales eventos son mucho más violentos que los del DG y están asociados a la frecuencia de choques entre complejos moleculares, a la interacción con remanentes de supernovas y a los flujos de material procedentes del centro de la Galaxia.

El estudio individual y detallado de los complejos moleculares de la ZMC será de gran ayuda para profundizar en el conocimiento del CG. En lo que sigue nos centraremos en la región de Sgr B2, probablemente la nube molecular más paradigmática del CG.

TABLA 3.2: *Propiedades físicas promedio de las nubes del CG.*

	Disco Galáctico	Centro Galáctico
Tamaño [pc]	—	20–30
Masa [ $M_\odot$ ]	—	$10^5$ – $10^6$
Densidad [ $\text{cm}^{-3}$ ]	$10^{2.5}$	$10^{4.0}$
Dispersión de velocidades [ $\text{km s}^{-1}$ ]	5	30
Campo Magnético [mG]	$\leq 0.1$	2
Temperatura promedio del polvo [K]	15–22	28
Temperatura cinética [K]: promedio	15	70
fase caliente	—	200

Tabla adaptada de Güsten 1989 y Mezger *et al.* 1996.

## 3.2 LA REGIÓN DE Sgr B2

Separado del centro de la Galaxia por una distancia proyectada de unos 100 pc, el complejo molecular gigante Sgr B2 (también G.0.67-0.05) aporta un  $\simeq 5\%$  de la componente gaseosa de la ZMC, siendo la nube molecular conocida más masiva de la Galaxia (Morris & Serabyn 1996). En los mapas del continuo a gran escala del CG tomados desde el IR-lejano hasta el radio (Odenwald & Fazio 1984; Lis & Carlstrom 1994; Downes *et al.* 1979), Sgr B2 aparece como la emisión más brillante de la región ( $L \simeq 10^7 L_{\odot}$ ; Thronson & Harper 1986). Con un tamaño angular de unos  $15'$  ( $\sim 40$  pc a una distancia de 8.5 kpc) y una masa de  $\simeq 10^7 M_{\odot}$  (Scoville, Solomon & Penzias 1975; Lis & Goldsmith 1989), comparte casi todas las propiedades fundamentales de las nubes del CG tratadas en la sección anterior. A diferencia de ellas, la densidad media del gas es 20-40 veces más elevada que en las nubes moleculares del mismo tamaño situadas en el disco (Goldsmith *et al.* 1990). Además, la enorme cantidad de gas y polvo en Sgr B2 y en su línea de mirada (hasta  $N(\text{H}_2) \simeq 10^{25} \text{ cm}^{-2}$ ) provoca que sea una fuente oscurecida incluso en el IR-medio, cercano y en rayos-X blandos. También se diferencia por su notable brote de formación de estrellas masivas OB, con tasas muy similares a las regiones más activas del disco. Todos los trazadores de esta actividad estelar, difíciles de encontrar en la población de nubes moleculares del CG, están presentes de forma inequívoca en esta extensa región. Los más destacados son: núcleos calientes y densos donde tiene lugar la evolución de proto-estrellas rodeadas de envolturas de polvo (Vogel *et al.* 1987, de Vicente *et al.* 1997); regiones HII ultra compactas generadas por el flujo UV de las estrellas recién formadas que fotoioniza el material que las rodea (Gaume *et al.* 1995 y referencias en él citadas); emisión de máseres moleculares (*p.ej.*,  $\text{H}_2\text{O}$ , Genzel & Downes 1977; u OH, Gaume & Claussen 1990); y elevada intensidad del continuo en el IR-lejano (Goldsmith *et al.* 1992). Todo este medio altamente fragmentado y numeroso en condensaciones de diferentes características cinéticas y fisicoquímicas se encuentra envuelto en una nube molecular gigante (Hüttemeister *et al.* 1995). El conocimiento que se tiene sobre el origen, las fuentes de energía, y mecanismos químicos que operan en la extensa *envoltura* es más limitado que el que se tiene de las fuentes compactas de la región. Uno de los objetivos de esta tesis es su estudio a través de la espectroscopia en el IR-lejano. En este trabajo se demuestra que sus características geométricas, físicas y químicas la convierten en una fuente *prototipo* para el estudio del ISM del CG y para la mejor comprensión de las propiedades de otros núcleos extragalácticos similares al nuestro.

Desde el punto de vista de su contenido molecular, Sgr B2 es un objeto único en la Galaxia para estudios espectroscópicos y para la búsqueda de nuevas especies moleculares. Alrededor del 50 % de las especies moleculares descubiertas en el espacio fueron detectadas por primera vez en Sgr B2. Además, el elevado flujo del continuo desde el IR-lejano hasta el radio ofrece una de las pocas líneas de mirada donde trazar el gas molecular en absorción. En esta tesis se aprovecha el potencial que ofrece la observación de esta peculiar nube en una ventana espectral inexplorada hasta la fecha.

### 3.2.1 ESTRUCTURA Y COMPONENTES

Sgr B2 es uno de los complejos moleculares más grandes y masivos del CG, con diversas estructuras que se solapan en la línea de mirada y que dificultan su análisis. La mayoría de las componentes relacionadas con la formación estelar se encuentran en el interior de tres grandes **condensaciones** de polvo situadas en una línea imaginaria Norte-Sur de unos  $2'$  ( $\sim 5$  pc).

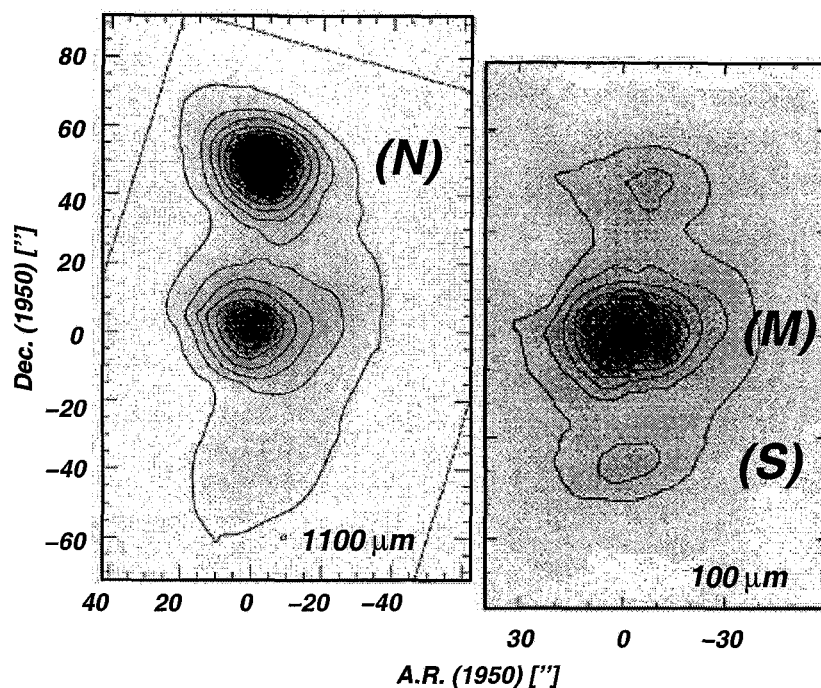


FIGURA 3.5: Mapas de la emisión del continuo de Sgr B2 a 1100 y 100  $\mu\text{m}$ . La posición central (0,0) es Sgr B2(M) ( $\alpha = 17^{\text{h}} 44^{\text{m}} 10^{\text{s}}.5$ ,  $\delta = -28^{\circ} 22' 05''$  [J1950]). El mapa de la izquierda muestra la emisión milimétrica con una resolución de 20''. El mapa de la derecha corresponde a la emisión en el IR-lejano con una resolución de 30'' (Goldsmith et al. 1990;1990).

Aquí se adopta su denominación histórica: Sgr B2(N), Sgr B2(M) y Sgr B2(S) para las condensaciones *NORTE*, *MEDIO* y *SUR* (FIG. 3.5). La posición y dimensiones de estas grandes condensaciones han sido determinadas frecuentemente mediante mapas del continuo milimétrico (*p.ej.*, Goldsmith et al. 1990; Gordon et al. 1993) e IR-lejano (Goldsmith et al. 1992). La separación angular entre las condensaciones Sgr B2(N) y Sgr B2(M) es de 48'' ( $\sim 2$  pc) y de unos 44'' ( $\sim 1.8$  pc) entre Sgr B2(M) y Sgr B2(S). Dentro de estas condensaciones de polvo se encuentran los **núcleos calientes** y densos ( $\sim 10^7 \text{ cm}^{-3}$ ) con tamaños próximos a 5'' ( $\sim 0.2$  pc; Vogel et al. 1987) y numerosas **regiones HII ultracompactas** (UC) con diámetros inferiores a 5000 UA generadas por las estrellas *OB* recién formadas en su interior (Gaume et al. 1995).

TABLA 3.3: Posición y tamaños de las principales condensaciones.

	A.R. (1950/2000)	DEC. (1950/2000)	50 $\mu\text{m}$	100 $\mu\text{m}$	1300 $\mu\text{m}$
Sgr B2(N)	$17^{\text{h}} 44^{\text{m}} 10^{\text{s}}.5 / 17^{\text{h}} 47^{\text{m}} 20^{\text{s}}.2$	$-28^{\circ} 21' 19'' / -28^{\circ} 22' 21''$	36''	16''	7'' $\times$ 9''
Sgr B2(M)	$17^{\text{h}} 44^{\text{m}} 10^{\text{s}}.7 / 17^{\text{h}} 47^{\text{m}} 20^{\text{s}}.5$	$-28^{\circ} 22' 04'' / -28^{\circ} 23' 06''$	14''	18''	8'' $\times$ 10''
Sgr B2(S)	$17^{\text{h}} 44^{\text{m}} 10^{\text{s}}.7 / 17^{\text{h}} 47^{\text{m}} 20^{\text{s}}.4$	$-28^{\circ} 22' 43'' / -28^{\circ} 23' 45''$	10''	10''	8.5'' $\times$ 9.5''

Tamaño de las condensaciones (FWHM) a 50 y 100  $\mu\text{m}$  (Goldsmith et al. 1992) y a 1300  $\mu\text{m}$  (Gordon et al. 1993) ajustando gaussianas a las fuentes más prominentes. La FWHM de Sgr B2 (N) a 50  $\mu\text{m}$  está probablemente sobrestimada debido a la débil intensidad medida.

Estas estructuras se encuentran rodeadas por una **nube ambiente** de gas moderadamente denso ( $10^5$ – $10^6$  cm $^{-3}$ ), con una extensión de 2.5 pc (E–O)  $\times$  5 pc (N–S) y que parece físicamente asociada con Sgr B2(M,N) (Lis & Goldsmith 1991; Hüttemeister *et al.* 1993a). Finalmente, estudiando la disminución de la temperatura cinética en función de la distancia al centro de la nube, de Vicente *et al.* (1997) encontraron un notable incremento de la temperatura en una franja de unos 1.6 pc de grosor a  $\sim$ 4 pc de distancia de las condensaciones centrales. A esta estructura de gas con forma anular la denominaron **anillo caliente** (ver FIG. 3.11).

Todo este medio se encuentra en el interior de una **extensa envoltura** molecular de unos 15' ( $\sim$ 40 pc) y densidad más baja ( $<10^4$  cm $^{-3}$ ), fácilmente observable en las transiciones rotacionales fundamentales de CO (Scoville *et al.* 1975; Bally *et al.* 1988). En las siguientes secciones se comprueba que es una de las componentes más interesantes de la galaxia.

### 3.2.2 LAS REGIONES HII Y EL GAS IONIZADO

Las densas envolturas de gas molecular y las condensaciones de polvo características de las nubes gigantes se hacen transparentes cuando se observan a longitudes de onda radio. A estas frecuencias, la emisión del continuo se produce por el *bremssstrahlung* que producen los electrones libres del gas ionizado. La FIG. 3.6 muestra que la región central de Sgr B2 está compuesta por varias regiones HII localizadas en el interior de las 3 principales condensaciones (Benson & Johnston 1984; Gaume & Claussen 1990). Destacan las regiones “K” en Sgr B2(N), las regiones “A–G”, “I” y “J” en Sgr B2(M) y la región “H” en Sgr B2(S). Con alta resolución espacial, estas regiones se fragmentan en  $\sim$ 60 regiones HII (Mehringer *et al.* 1993; Gaume *et al.* 1995). Además, existe otro conjunto regiones HII compactas no asociadas a estas condensaciones centrales pero también pertenecientes al complejo (Martin & Downes 1972). Estas estructuras son el resultado de la fotoionización que provoca el flujo UV de las estrellas *OB* sobre el material ambiente del que se formaron. Todas estas radio fuentes compactas parecen estar rodeadas por una extensa región de gas ionizado de baja densidad en forma de halo difuso y de dimensiones  $\sim 10' \times 5'$  ( $\sim 25$  pc  $\times$  12 pc [l,b]). Esta componente es responsable del  $\geq 50$  % del flujo total medido en el radio-continuo (Akabane *et al.* 1988; Listz 1992; Mehringer *et al.* 1993).

A diferencia de su vecina Sgr B1, donde dominan las radio fuentes extensas, Sgr B2 está formado por multitud de regiones HII UC con diámetros  $< 0.1$  pc y densidades  $n_e \geq 10^4$  cm $^{-3}$ . Pese al elevado número de fuentes detectadas existen pocas variedades morfológicas que representen a la mayoría de formas encontradas (Wood & Churchwell 1989). Las formas circulares de brillo simétrico, características de una región HII ópticamente delgada expandiéndose en un medio uniforme son poco abundantes. Por el contrario, dominan las regiones HII con distribución de brillo asimétrica, en forma burbuja, de arco y algunas cometarias, propias de la expansión del gas ionizado de la región HII en un medio denso y fragmentado con distribución de densidad anisótropa (Gaume *et al.* 1995). Debido a la abundancia de las regiones HII en la Galaxia y a su tamaño medio, se estima que esta fase representa el 10 % de la vida de una estrella masiva O en la secuencia principal ( $10^4$  –  $10^5$  años). Sin embargo, bajo las suposiciones de los modelos clásicos de expansión del gas ionizado, el pequeño tamaño de las regiones HII UC en Sgr B2 indicaría edades mucho más bajas simultáneamente para todas ellas (*p.ej.*, De Pree *et al.* 1996). Puesto que esto es improbable, el tiempo de supervivencia de las regiones HII UC en Sgr B2 tiene que ser mayor que sus escalas de expansión dinámica ( $\sim 10^3$  años).



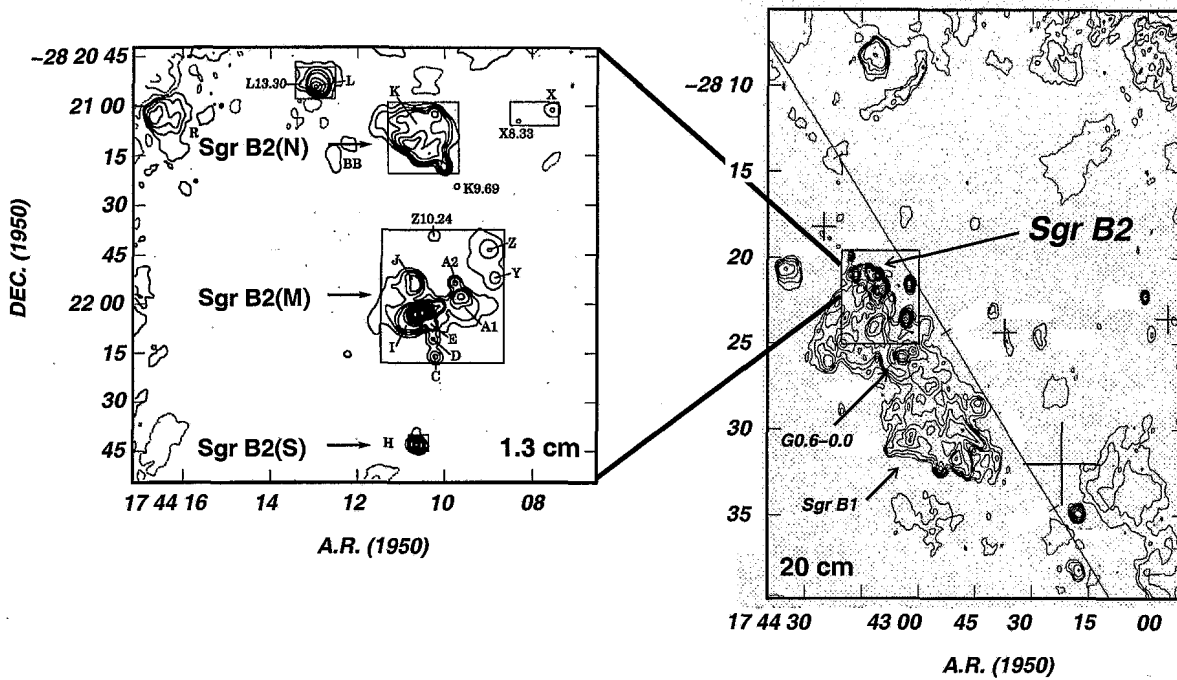


FIGURA 3.6: Mapas interferométricos del radiocontinuo en Sgr B2 a 1.3 cm (resolución  $\sim 0.25''$ ) y 20 cm (resolución  $\sim 20''$ ). Sgr B2 está compuesta por numerosas regiones HII. Las coordenadas son A.R. (h m s) y DEC. ( $^{\circ}$  ' ") [1950]. De Gaume et al. (1995) y Mehringer et al. (1993).

Los modelos clásicos de expansión de regiones HII UC, *p.ej.*, los de *champagne flow* (flujo de champán) o de *bow shocks* (choques de proa), parece que no resuelven esta "paradoja de la edad" ni tampoco las diferentes morfologías encontradas. Más prometedores parecen los modelos de *fototevaporación de discos* de acreción remanentes del material pre-estelar alrededor de las estrellas recién formadas. Este mecanismo, inyectaría progresivamente gas ionizado en la región HII en expansión, alargando su vida media y haciéndola compatible con la observaciones (Hollenbach et al. 1994). Las dimensiones de las regiones HII formadas serían entonces proporcionales a la intensidad de los vientos estelares.

El gas ionizado se puede además trazar mediante la observación de líneas de recombinación a longitudes de onda radio. Este tipo de estudios añade información sobre la cinemática del gas en las regiones HII, las temperaturas electrónicas y las abundancias de He.

En Sgr B2 se han realizado numerosos trabajos con líneas de recombinación, *p.ej.*, H76 $\alpha$  (Roelfsema et al. 1987; Gaume & Claussen 1990), H110 $\alpha$  y H109 $\alpha$  (Mehringer et al. 1993) y H52 $\alpha$  y H66 $\alpha$  (De Pree et al. 1996). Estos estudios muestran que la mayoría del gas ionizado aparece a velocidades en el rango  $V_{LSR} = 50 - 70 \text{ km s}^{-1}$  y anchuras de línea típicas de  $20 \text{ km s}^{-1} \leq \Delta v \leq 40 \text{ km s}^{-1}$ , existiendo componentes de velocidad a  $\sim 100 \text{ km s}^{-1}$ . Promediando varias de estas medidas se encuentra que la temperatura electrónica media es  $\langle T_e \rangle = 7150 \text{ K}$ , unos 2000 K superior a la encontrada en Sgr B1, 10' ( $\sim 25 \text{ pc}$ ) al sur de Sgr B2 (Mehringer et al. 1992). Estas diferencias pueden deberse al tipo espectral de las estrellas que ionizan ambos complejos, a variaciones en la metalicidad, o cambios en la densidad electrónica de las dos regiones (Rubin 1985). Los autores anteriores sugieren que lo más plausible es que una menor metalicidad en Sgr B2 sea la responsable del incremento de la temperatura electrónica.

Para algunas fuentes ionizantes particulares de Sgr B2 (*p.ej.*, la región HII Sgr B2 F), se detectan anchuras de hasta  $\Delta v \simeq 60 \text{ km s}^{-1}$  y temperaturas electrónicas de 26000 K. Esta es la misma posición de un intenso flujo molecular observado por Lis *et al.* (1993), lo que indica que las elevadas temperaturas electrónicas provienen del gas en una zona alejada del equilibrio, probablemente en la frontera de una región HII en expansión (Mehring *et al.* 1995). En las condensaciones centrales, el radiocontinuo está también asociado con máseres OH y H<sub>2</sub>O, indicando que las regiones HII UC están relacionadas con choques u otros movimientos dinámicos asociados con la formación estelar. En particular la anchura de las líneas de recombinación apoyan la presencia de flujos de material y/o vientos estelares (De Pree *et al.* 1996), mientras que las observaciones moleculares de alta resolución sugieren la presencia de un disco de material rotante (Gaume & Claussen 1990; Lis *et al.* 1993). Estos indicadores favorecen los modelos de fotoevaporación de discos alrededor de estrellas masivas como mecanismo de supervivencia de algunas regiones HII UC. En aquellas regiones donde el gas molecular alrededor de las radio fuentes es muy denso ( $n(\text{H}_2) = 10^7 - 10^8 \text{ cm}^{-3}$ ), las regiones HII UC pueden también encontrarse confinadas por equilibrio de presiones con su entorno, contribuyendo así al aumento de su vida media (de Pree, Goss & Gaume 1998). De lo contrario, estas serían muy jóvenes ( $< 10^3$  años) puesto que multitud de regiones HII de Sgr B2 están realmente formadas por componentes más pequeñas (hasta  $\sim 0.001 \text{ pc}$ ) cuando se observan con mayor resolución espacial.

Las observaciones en rayos-X complementan este escenario de gran nube molecular con varios cúmulos de objetos estelares jóvenes (YSOs). Estos fotones energéticos penetran en las nubes de gas neutro más profundamente que los fotones UV, pudiendo causar un importante impacto en la fotoionización y en la química del gas. Sgr B2 muestra una emisión difusa en la línea  $K\alpha$  a 6.4 keV de átomos de Fe (Koyama *et al.* 1996; Murakami *et al.* 2001). Según estos autores, tanto el espectro como la distribución geométrica observada puede ser explicada si Sgr B2 es una nebulosa de reflexión de rayos-X (XRN) irradiada por una fuente externa situada en la dirección del centro de la Galaxia (Murakami *et al.* 2000). Sin embargo, recientemente se ha encontrado una docena de fuentes compactas de rayos-X en la propia Sgr B2 que podrían ser el origen de toda la emisión observada (Takagi *et al.* 2002). Las más brillantes están situadas dentro de Sgr B2(M), aunque también existen fuentes compactas asociadas a Sgr B2(N) y (S) que provienen de los cúmulos de estrellas masivas que allí se están formando.

### 3.2.3 LOS NÚCLEOS CALIENTES Y EL GAS DENSO

En una fase anterior a la formación de la región HII, se espera que las proto-estrellas masivas comiencen a irradiar parte de su energía en el interior de densas envolturas de polvo y gas molecular. Estos grumos de materia podrán distinguirse del resto del gas de la nube molecular por su elevada temperatura y densidad. Son los llamados *hot cores* (núcleos calientes). Debido a estas especiales propiedades, se necesitan trazadores moleculares con alto momento dipolar eléctrico y relativa baja opacidad que sólo sean sensibles a este gas. En el interior de las condensaciones principales Sgr B2(N) y Sgr B2(M), se han detectado sendos núcleos calientes ( $T_k \approx 200 \text{ K}$ ) y densos ( $n(\text{H}_2) \approx 10^7 \text{ cm}^{-3}$ ) con  $\sim 0.2 \text{ pc}$  de diámetro, mediante la observación de líneas no-metaestables de amoníaco (Vogel, Genzel & Palmer 1987) y líneas rotacionales excitadas de HC<sub>3</sub>N (Lis & Goldsmith 1991). Estas componentes coinciden espacialmente con los flujos bipolares densos observados en HC<sub>3</sub>N con alta resolución (Lis *et al.* 1993).

Efectivamente, se piensa que los núcleos calientes están asociados y/o inmersos en flujos moleculares relacionados con las primeras etapas de la formación estelar (Genzel *et al.* 1982). Las observaciones sugieren que este gas denso se aleja de una supuesta fuente central puesto que su cinemática no es compatible con la *caída libre* del material hacia una proto-estrella. El núcleo caliente localizado en Sgr B2(N) parece contener mayor cantidad de gas molecular alrededor de su estrella en formación, siendo también mayores su densidad, pérdida de masa, velocidad media del flujo, y opacidad del continuo (Lis *et al.* 1993; Martín-Pintado *et al.* 1990). A diferencia de su análogo en Sgr B2(M), este núcleo no tiene asociado ninguna región HII UC prominente. Para Vogel *et al.* y Lis *et al.*, el núcleo caliente situado en Sgr B2(N) representa un estado evolutivo anterior a la emergencia de la región HII UC, con una cantidad considerable de gas todavía en la vecindad de su proto-estrella. La elevada velocidad de la emisión H<sub>2</sub>O maser encontrada en el centro del flujo (Reid *et al.* 1988) indica que este gas circundante está siendo dispersado eficazmente por una estructura de material denso en forma de disco rotante que colima el gas y lo expulsa de forma bipolar (Lis *et al.* 1993). El núcleo caliente situado en Sgr B2(M) presenta por su parte, menor contenido molecular y una región HII UC en su interior. En poco tiempo, el gas molecular se habrá dispersado en la dirección del eje de expansión de la región HII, dejando un disco de gas que irá siendo ionizado y fotoevaporado por la nueva estrella (Vogel *et al.* 1987). Uno de los efectos que produciría el empuje (y choque) de la expansión del gas ionizado sobre el entorno molecular denso sería la emisión térmica de metanol (CH<sub>3</sub>OH) observada en las capas externas de algunas regiones HII UC (Meheringer & Menten 1997).

A las elevadas densidades y temperaturas de estas condensaciones, se espera que el gas molecular y el polvo estén térmicamente acoplados. El mecanismo de calentamiento dominante del gas molecular son las *colisiones grano-gas*. El continuo milimétrico empieza a ser sensible al polvo caliente, cuya temperatura es parecida a la temperatura cinética ( $T_k = 150 - 300$  K) encontrada en los núcleos calientes (Lis *et al.* 1993; Martín-Pintado *et al.* 1990).

Alrededor de estas fuentes existe una nube ambiente de gas moderadamente denso ( $10^5 - 10^6$  cm<sup>-3</sup>), y temperaturas menores que en los núcleos calientes, de forma elongada y unos 10 pc de diámetro (Lis & Goldsmith 1991; Hüttemeister *et al.* 1993a; ver SEC. 3.2.4).

En la sección anterior se comentó la detección de alrededor de 60 regiones HII UC en Sgr B2, la mayoría de ellas agrupadas en dos cúmulos dentro de las condensaciones principales. Se espera que estas regiones den lugar a algunos cúmulos de estrellas masivas similares al cúmulo de *Los Arcos*, también en el CG (FIG. 3.4), una vez que los flujos moleculares y los vientos estelares hallan dispersado todo el material circundante. La observación de núcleos calientes en nubes moleculares puede ayudar a detectar lugares donde también puedan formarse nuevas estrellas pero que aún no han empezado a ionizar sus alrededores y son invisibles en el radiocontinuo. Sin embargo, el número de núcleos calientes detectados hasta hace unos años en Sgr B2 era sólo de dos, y además en las cercanías de las regiones HII. Las distintas vidas medias de las regiones HII UC ( $\sim 10^5$  años; Hollenbach *et al.* 1994) y de los núcleos calientes ( $\sim 10^3 - 6 \cdot 10^4$  años; Kurtz *et al.* 2000) contribuyen a la diferencia en el número de detecciones realizadas de unas y otros. Además, para la detección de núcleos calientes y densos mediante observaciones de la emisión del continuo y/o de líneas moleculares en la región milimétrica, se necesita mayor sensibilidad que para la detección de regiones HII UC en el dominio radio.

Las pocas observaciones interferométricas de este tipo han mostrado recientemente la presencia de pequeños ( $\leq 0.05$  pc) núcleos calientes fuera de las condensaciones centrales. Por un lado en la cresta de materia que une Sgr B2(N) con (M) (de Vicente *et al.* 2000) y por otro, en la envoltura sur de Sgr B2 (Martín-Pintado *et al.* 1999). Aunque pueden tratarse de regiones de formación de estrellas masivas más o menos aisladas, estas detecciones muestran que la formación estelar en Sgr B2 no se limita a las condensaciones centrales. Los nuevos núcleos calientes no tienen fuentes de radiocontinuo asociadas, mostrando que en su interior existen fuentes IR que todavía no ionizan el material ambiente. La luminosidad de estas fuentes ( $L \approx 10^7 L_{\odot}$ ), la temperatura cinética ( $T_k \approx 300$  K) y la densidad ( $n_{H_2} \approx 10^7 \text{ cm}^{-3}$ ) no difieren apreciablemente de aquellas en los núcleos calientes en Sgr B2(N) y (M). Otra consecuencia de las observaciones de alta resolución es que el núcleo caliente en Sgr B2(N) se rompe en dos núcleos de diferentes velocidades radiales, sugiriendo que este tipo de estructuras están realmente compuestas por varios núcleos más pequeños y compactos (de Vicente *et al.* 2000).

### 3.2.4 SGR B2 A MEDIA ESCALA

El análisis de Sgr B2 en su conjunto se basa en los distintos estudios realizados a media escala a partir de observaciones bolométricas y espectrales en el IR y en milimétricas.

### EL POLVO

La emisión del continuo asociada a la emisión térmica del polvo en Sgr B2 ha sido cartografiada a diferentes longitudes de onda. Debido a los cambios de opacidad y temperatura del polvo característicos de cada rango espectral, la morfología de la emisión del continuo varía considerablemente según la longitud de onda de la observación.

La emisión del continuo en las regiones milimétrica y submilimétrica puede tener su origen en varios procesos físicos. La contribución dominante procede de la emisión térmica de los granos de polvo calentados por la absorción del campo de radiación UV generado por las estrellas OB cercanas y por la propia emisión de otros granos de polvo. En esta región del espectro, la emisión del continuo es ópticamente delgada, siendo el flujo medido directamente proporcional a la profundidad óptica y a la densidad de granos presentes en la línea de mirada. La segunda contribución a la emisión del continuo se debe a la emisión de líneas moleculares cuando la densidad de líneas por intervalo espectral es suficientemente elevada. En ese caso, se suele descontar arbitrariamente hasta un 40% del flujo del continuo si las líneas son particularmente intensas (Gordon 1995). A longitudes de onda más largas que 1 mm aparece una tercera contribución procedente de la emisión *libre-libre* de los electrones pertenecientes al gas ionizado de las regiones HII. La emisión del continuo a  $\lambda > 3$  mm corresponde casi en su totalidad al *bremsstrahlung* y no contiene emisión del polvo.

Finalmente, el continuo medido en el IR-lejano traza únicamente la emisión térmica del polvo a las temperaturas características del ISM. Notar que el máximo de emisión de un *cuerpo negro* a 30 K ocurre a unas 100  $\mu\text{m}$ . Dado que la opacidad de los granos de polvo es inversamente proporcional a la longitud de onda (Hildebrand 1983), en regiones tan opacas como Sgr B2 esta emisión puede ser ópticamente espesa para  $\lambda < 200 \mu\text{m}$ . Esta característica dificulta la interpretación de los datos, puesto que las temperaturas del polvo derivadas, serían únicamente un promedio sobre las capas más externas de las nubes moleculares, sus *envolturas*.



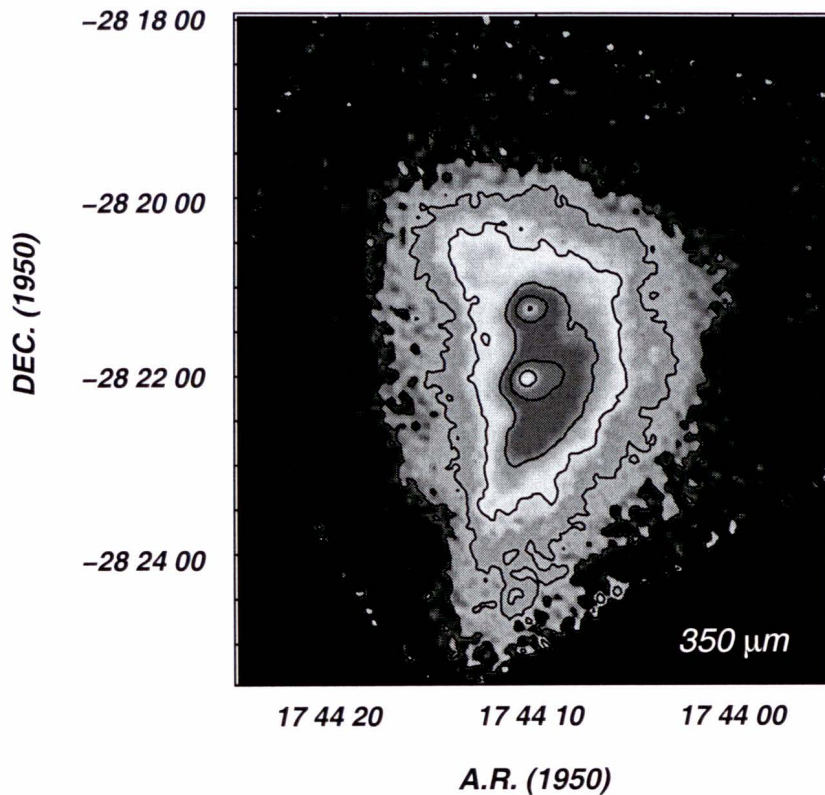


FIGURA 3.7: Mapa de la emisión del polvo en Sgr B2 a  $350 \mu\text{m}$  tomada con el CSO. Las coordenadas son A.R. (h m s) y DEC. ( $^{\circ}$  ' ") [1950]. (Dowell et al. 1998).

En los primeros estudios del continuo en el IR-lejano de finales de los setenta (Erickson et al. 1977; Harvey et al. 1977), Sgr B2 aparecía como una extensa región del CG, muy luminosa en el IR-lejano, pero con una temperatura del polvo ( $T_{\text{polvo}} \simeq 35 \text{ K}$ ) considerablemente inferior a la temperatura del gas inferida mediante espectroscopia molecular. En estos trabajos pioneros se ajustaba el flujo medido mediante modelos de emisión de un cuerpo negro a temperatura uniforme. Casi 10 años después, Thronson & Harper (1986) introdujeron la idea de que una *envoltura* opaca de polvo frío podría absorber la emisión interna del polvo caliente característico de las condensaciones de formación estelar. La gran extinción visual derivada explicaría entonces las altas densidades de columna observadas.

Posteriormente se ha cartografiado la región en algunas longitudes de onda determinadas del IR-lejano con mayor resolución y sensibilidad. En particular, se detectaron separadamente las 3 condensaciones principales de Sgr B2 a 50 y  $100 \mu\text{m}$  (FIG. 3.5), encontrándose evidencias de una componente de polvo extensa alrededor de estas (Goldsmith et al. 1992). Los mapas tomados con IRAS a 100 y  $60 \mu\text{m}$  (FIG. 5.1) de una región mucho más amplia del cielo ( $1^{\circ} \times 1^{\circ}$ ), además muestran que la emisión del polvo en el IR-lejano se extiende mucho más allá de los contornos tomados con KAO por Goldsmith et al. Las temperaturas de color derivadas hacia Sgr B2 son de  $\approx 35 \text{ K}$ , lo cual constituye un límite superior a la temperatura promedio del polvo en la línea de mirada. A esta emisión del polvo a gran escala contribuye tanto el polvo frío de la envoltura de Sgr B2, como el polvo difuso del CG calentado por el campo de radiación interestelar de la región (Gordon et al. 1993). Debido al gran tamaño del *haz* principal de IRAS ( $\sim 3'$ ), resulta complicado separar ambas componentes.

Los mapas de la emisión térmica del polvo en la región milimétrica del espectro tomados desde radiotelescopios terrestres ofrecen un mayor detalle de la morfología del polvo en Sgr B2. Estos son más sensibles a las condiciones físicas (temperatura del polvo y densidad de columna) de las condensaciones y núcleos de formación estelar. Existe un número considerable de estudios de este tipo que comenzaron a realizarse a principios de los noventa: a 1.3, 1.1, 0.85, 0.45 y 0.35 mm (Goldsimth *et al.* 1990); 1.3 y 0.8 mm (Lis *et al.* 1991); 2.9, 1.3 y 0.87 mm (Gordon *et al.* 1993); 0.8 mm (Lis & Carlstrom 1994); y a 2.7 mm (Kuan *et al.* 1996). En la FIG. 3.7 se presenta un mapa reciente del continuo submilimétrico a 350  $\mu\text{m}$  de Sgr B2.

Mediante modelos de la transferencia de radiación del continuo alrededor de Sgr B2(M) y (N) se han podido estimar los principales parámetros físicos de las dos condensaciones y de su envoltura (Goldsimth *et al.* 1990; Lis & Goldsmith 1990). Estos modelos representan esquemáticamente a Sgr B2(M) como una condensación de radio  $r \approx 0.5$  pc, situada en el centro de una envoltura radio  $R = 45$  pc de diámetro. Sgr B2(N) es tratada como otra condensación independiente de radio  $r \approx 0.4$  pc, situada en el interior de la envoltura. Para unos parámetros estandar del polvo, una luminosidad específica para cada fuente central y una distribución de la densidad de material fuera de las condensaciones dada por:

$$n = n_1 + n_2 \quad \text{para } r \leq r_0 \quad (3.3)$$

$$n(r) = n_1 \left( \frac{r_0}{r} \right)^2 + n_2 \quad \text{para } r_0 \leq r \leq R \quad (3.4)$$

los modelos calculan la distribución de temperaturas del polvo y su emisión en función de la distancia a Sgr B2(M). En la TABLA 3.4 se resumen los parámetros del mejor ajuste obtenido por estos autores.

TABLA 3.4: *Parámetros del polvo según la emisión del continuo milimétrico*

	Sgr B2 (M)	Sgr B2 (N)
CONDENSACIÓN:		
$r_c$ [pc] .....	0.5	0.4
$n_c$ [ $\text{cm}^{-3}$ ] .....	$3.9 \cdot 10^6$	$1.7 \cdot 10^7$
$M$ [ $M_\odot$ ] .....	$2.9 \cdot 10^4$	$6.4 \cdot 10^4$
$L$ [ $L_\odot$ ] .....	$1.3 \cdot 10^7$	$1.7 \cdot 10^6$
$T_{\text{polvo}}$ [K] <sup>a</sup> .....	60	50
ENVOLTURA:		
$n_1$ [ $\text{cm}^{-3}$ ] .....	$6.1 \cdot 10^4$	—
$n_2$ [ $\text{cm}^{-3}$ ] .....	$2.4 \cdot 10^3$	—
$r_0$ [pc] .....	1.25	—
$R$ [pc] .....	22.5	—
$M$ [ $M_\odot$ ] .....	$6.9 \cdot 10^6$	—
$T_{\text{polvo}}$ [K] <sup>a</sup> .....	19	—

*Derivados de los modelos de transferencia de radiación del continuo (Goldsmith et al. 1990).*

<sup>a</sup> *Temperatura promedio derivada de ajustes con cuerpos-grises (Gordon et al. 1993).*

Debido al acoplamiento térmico entre el gas y el polvo en las regiones más densas de las condensaciones (SEC. 3.2.3) la temperatura del polvo a pequeñas distancias es elevada ( $T_{polvo} = 150 - 300$  K), y va decreciendo a medida que nos alejamos de las fuentes que calientan el polvo de las condensaciones y la densidad va disminuyendo. Habitualmente también se estudia la emisión térmica del polvo mediante el análisis de *cuerpos-grises*. En esta aproximación se ajusta la emisión del continuo con una o varias *distribuciones de Planck* a una temperatura uniforme pero corregidas por un factor de opacidad (ver SEC. 4.2). Este sencillo análisis suele proporcionar resultados satisfactorios para la temperatura promedio del polvo en esas componentes. Aplicados a Sgr B2 en el rango milimétrico se concluye que la temperatura promedio del polvo en Sgr B2 (N), (M) y (S) es 60, 50 y 45 K respectivamente, mientras que en la envoltura detectada en milimétricas, desciende hasta los 19 K (Gordon *et al.* 1993).

Uno de los resultados más interesantes y contradictorios del estudio de la emisión del continuo en Sgr B2 es la diferente distribución y morfología del polvo en el IR y en milimétricas (ver FIG. 3.5). Mientras que en el IR-lejano el máximo de emisión está centrado en Sgr B2(M), la emisión en milimétricas se extiende alrededor de Sgr B2(M) y (N), teniendo su máximo de emisión en Sgr B2(N). Mediante el cociente de intensidades del continuo entre Sgr B2(M) y Sgr B2(N) a distintas longitudes de onda  $[N/M]$ , podemos analizar las características del polvo en la región central de la nube y comprender la situación y diferencias entre las dos condensaciones. El cociente a  $53 \mu m$  es  $[N/M] \ll 1$  (Harvey *et al.* 1977), con lo que Sgr B2(N) es prácticamente invisible a estas longitudes de onda (Goldsmith *et al.* 1992). Sin embargo, a  $1300 \mu m$  el cociente es  $[N/M] \gg 1$  (Goldsmith *et al.* 1987).

Teniendo en cuenta las principales características de los modelos del polvo presentados en la TABLA 3.4, y que no difieren cualitativamente de otros modelos menos detallados existentes en la literatura, podemos entender estos cocientes  $[N/M]$  si Sgr B2(N) se sitúa detrás del plano de Sgr B2(M), en el interior de la propia envoltura de Sgr B2(M). Además de que Sgr B2(N) parece ser más masivo, su línea de mirada tiene una densidad de columna más elevada, resultando en una mayor emisión cuando esta es ópticamente delgada (a longitudes de onda milimétricas). Sin embargo, en el IR-lejano, donde la opacidad del continuo es más elevada, parte de la emisión del polvo caliente procedente de Sgr B2(N) es absorbida y atenuada por la gran cantidad de polvo frío que tiene enfrente (Thronson & Harper 1986; Goldsmith *et al.* 1990).

## EL CAMPO MAGNÉTICO

Bien es sabido que los campos magnéticos juegan un papel significativo en la evolución y dinámica de las nubes moleculares (Spitzer 1978). Midiendo la polarización lineal de la emisión térmica de los granos de polvo alineados magnéticamente, se puede determinar la orientación de estos campos magnéticos (Hildebrand 1988). Los análisis polarimétricos de Sgr B2 han analizado la emisión del continuo a:  $60 \mu m$  (Dowell 1997);  $115 \mu m$  (Novak *et al.* 1997);  $350 \mu m$  (Dowell *et al.* 1998);  $800 \mu m$  (Greaves *et al.* 1995), y a  $1300 \mu m$  (Kane *et al.* 1993). Estos estudios muestran que Sgr B2 también es una nube peculiar en cuanto a las características de la polarización de su polvo. A diferencia de otros complejos de formación estelar donde también se han realizado estudios similares, la polarización en Sgr B2 a una longitud de onda determinada,  $P(\lambda_0)$ , está correlacionada con la opacidad del continuo, teniendo su máximo en Sgr B2(N). Además, la polarización,  $P(\lambda)$ , va disminuyendo con la longitud de onda (Dowell 1997).

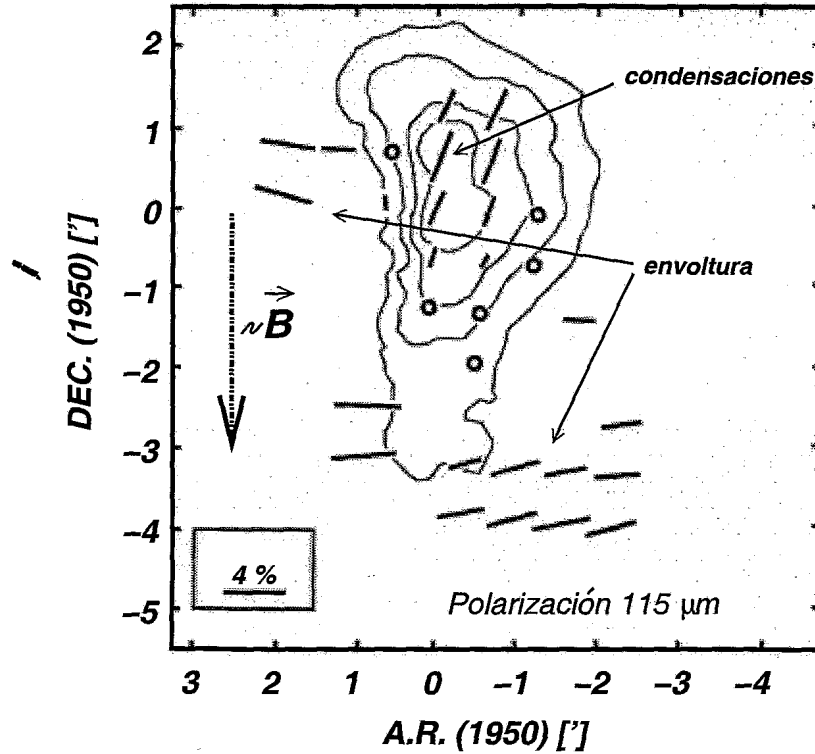


FIGURA 3.8: Mapa de Sgr B2 a  $1300 \mu\text{m}$  y polarización a  $115 \mu\text{m}$ . Las barras muestran las posiciones donde se ha detectado polarización, siendo su longitud proporcional al grado de polarización. Los círculos representan  $P(\lambda_{115}) < 2\%$ . Desplazamientos en las coordenadas medidos respecto a  $\alpha = 1^{\text{h}}44^{\text{m}}10^{\text{s}}.5$ ,  $\delta = -28^{\circ}22'00''$  [J1950]. (Adaptado de Novak et al. 1997).

Estudiando los posibles mecanismos de polarización, se concluye que efectivamente sólo los granos de polvo alineados por la presencia de un campo magnético pueden producir la polarización observada. Sin embargo, los mecanismos físicos que producen el alineado de los granos son diferentes según se trate de la emisión del continuo en la región central ( $\sim 10 \text{ pc}$ ) más densa, o en la extensa envoltura ( $\sim 40 \text{ pc}$ ) alejada de las condensaciones de formación estelar. Para la nube ambiente densa, la emisión del polvo caliente procedente de las condensaciones es polarizado selectivamente por la gran cantidad de polvo frío ( $T_{\text{polvo}} \simeq 20 \text{ K}$ ) situado enfrente. El mecanismo dominante es la *absorción* de granos de polvo alineados, siendo el campo magnético paralelo a los vectores de polarización (Dowell 1997). Entonces,  $P(\lambda_0)$  aumenta en las regiones de mayor opacidad del continuo porque en ellas existe mayor cantidad de polvo frío, mientras que  $P(\lambda)$  disminuye con  $\lambda$  porque la opacidad también decrece con la longitud de onda. En la envoltura extensa, domina el mecanismo de *emisión* de granos alineados donde los vectores de polarización son perpendiculares al campo magnético (Novak et al. 1997). Puesto que se observa que la polarización cambia su dirección  $\sim 90^\circ$  al pasar de la envoltura a las condensaciones, el campo magnético en Sgr B2 ( $\sim 150 \mu\text{G}$ ; Novack et al. 1997) mantiene una dirección ordenada (proyectada sobre el plano del cielo) aproximadamente Norte-Sur (ver FIG. 3.8).

Sólo en la región central elongada, la cuál incluye las principales condensaciones y regiones HII, las líneas del campo magnético están más distorsionadas o desordenadas (véase el mapa de la polarización a  $350 \mu\text{m}$ ; Dowell et al. 1998). En las siguientes secciones se verá que algunos autores relacionan esta distorsión con la compresión de regiones sometidas a frentes de choques a gran escala (p.ej., Sato et al. 2000).



## EL GAS NEUTRO

Desde el punto de vista de la espectroscopia molecular, Sgr B2 es una de las regiones más profusamente estudiadas de la Galaxia. Las especiales condiciones físico-químicas de sus diferentes componentes han hecho común que Sgr B2 sea el lugar donde se hayan detectado por primera vez una fracción considerable de las moléculas del espacio y/o donde se confirme la primera detección de nuevas especies en otras regiones de la Galaxia. La mayoría de estos estudios se han centrado en los  $\sim 10$  pc centrales de la nube, donde el gas es más denso y se favorece la excitación de moléculas con alto momento dipolar. Al elevado número de moléculas y transiciones de una misma especie detectadas contribuye fundamentalmente la gran densidad de columna de  $H_2$  en toda la región y la elevada densidad y temperatura del gas alrededor de las condensaciones. Esta combinación de parámetros permite la excitación colisional necesaria para la observación de la emisión de multitud de líneas moleculares. Además, la sublimación y/o erosión de los mantos de hielo que rodean a los granos de polvo proporciona un enriquecimiento adicional del medio y un aumento de la abundancia de ciertas especies en fase gaseosa. Como ejemplo, citamos el *survey* espectral de las condensaciones de Sgr B2 en la ventana  $\sim 1.1-1.4$  mm, donde se detectan 42 especies moleculares diferentes (Nummelin *et al.* 1998, 2000).

Debido a las distintas componentes de Sgr B2, la distribución en densidad y temperatura cinética del gas neutro en función de la distancia al centro de la nube se realiza con diferentes diagnósticos moleculares. Sin embargo, dadas las distintas condiciones de excitación, opacidad y abundancia de cada especie, las morfologías y parámetros físicos derivados pueden variar según el trazador utilizado. Además, la emisión/absorción del gas neutro asociado dinámicamente a Sgr B2 se produce en un intervalo de velocidades muy ancho ( $V_{LSR} \simeq 0 - 100$  km s $^{-1}$ ), cuyo estudio requiere el análisis de varias componentes diferenciadas. En multitud de observaciones a media escala, se aprecia un gradiente de velocidades entre 50 y 80 km s $^{-1}$  interpretado como la rotación del complejo (con eje de rotación Este-Oeste Goldsmith *et al.* 1987), o más probable, como cambios en la distribución de las diferentes nubes asociadas a Sgr B2 y que componen la línea de mirada ( $\sim 55$ ,  $\sim 65$  y  $\sim 80$  km s $^{-1}$ ; Martín-Pintado *et al.* 1990). En este último contexto, existe un consenso mayoritario en que la nube principal se encuentra a  $\sim 65$  km s $^{-1}$ , velocidad radial a la que se detecta el máximo de emisión/absorción de la mayoría de líneas moleculares. La nube a  $\sim 80$  km s $^{-1}$ , por su parte, es menos extensa que la anterior y sólo aparece predominantemente alrededor Sgr B2(N) (Martín-Pintado *et al.* 1990; ver FIG. 3.9).

La presencia de una nube ambiente ( $\sim 10$  pc) de gas moderadamente denso alrededor de Sgr B2(M,N) resultó evidente después de los mapas realizados de la emisión de diversos trazadores moleculares de alta densidad. En esta región elongada ( $\sim 2.5$  pc [E-O]  $\times$  5 pc [N-S], según observaciones de  $NH_3$ ) de densidad promedio  $n(H_2) \simeq 10^5$  cm $^{-3}$  coexisten varias componentes de distinta temperatura cinética. Por un lado, una componente de gas a  $T_k \simeq 100$  K derivada de la emisión de líneas no-metaestables de  $NH_3$  (Hüttemeister *et al.* 1993a), y por otro, una componente a  $T_k = 20-40$  K estimada a partir de la emisión de líneas rotacionales de  $HC_3N$  (Goldsmith *et al.* 1987; Lis & Goldsmith 1991). Del estudio de la distribución de  $T_k$  a partir de observaciones de  $CH_3CN$ , se concluye que la temperatura va descendiendo con la distancia a las condensaciones ( $T_k = 80 \rightarrow 40$  K), salvo en el anillo caliente. En esta estructura, probablemente la frontera entre la nube molecular densa y la burbuja ionizada creada por las estrellas OB, la temperatura cinética asciende hasta los  $T_k = 100-120$  K en una estrecha franja de unos  $40''$  ( $\sim 1.6$  pc) de anchura (de Vicente *et al.* 1997).

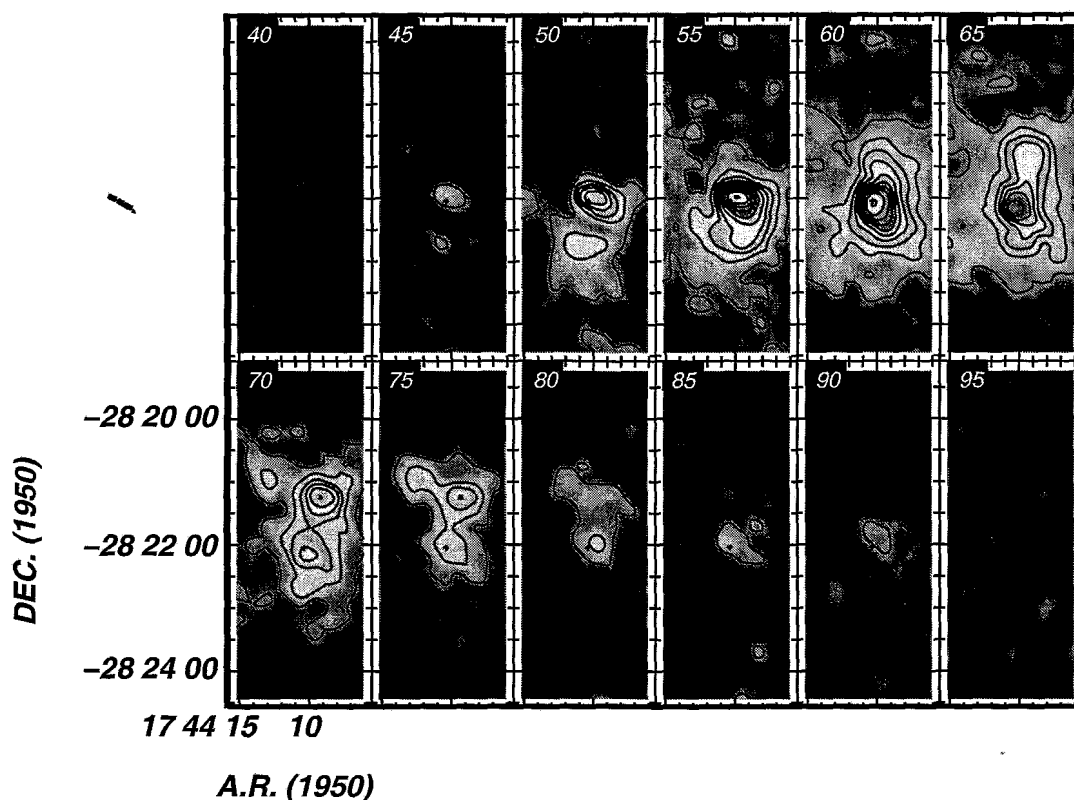


FIGURA 3.9: Mapa de Sgr B2 de la intensidad integrada para diferentes velocidades radiales (esquina superior derecha de cada panel) en la línea rotacional  $J=3-2$  de  $C^{18}O$ . Observado con el CSO. Las coordenadas son A.R. (h m s) y DEC. ( $^{\circ}$  ' ") [1950]. (D.C. Lis et al. sin publicar).

Aunque las condensaciones centrales contribuyen al  $\geq 50$  % de la luminosidad total, la gran *envoltura* de Sgr B2 contiene el  $\sim 95$  % de la masa del complejo (Gordon *et al.* 1993). La gran envoltura de Sgr B2 ( $\sim 15'$ ) resulta especialmente aparente en los mapas de la emisión de  $^{13}CO$  y  $C^{18}O$  (p.ej., Lis & Goldsmith 1989; Sato *et al.* 2000) y en la absorción de líneas metaestables de  $NH_3$  (Wilson *et al.* 1982; Hüttemeister *et al.* 1993a). A partir de las observaciones de CO y basándose en un modelo de nube esférica con dos componentes de densidad (ver ECS. 3.3 y 3.4) similar al presentado en la TABLA 3.4, Lis & Goldsmith (1990) estiman una densidad media en la envoltura de  $n(H_2)=2100-4300\text{ cm}^{-3}$  y una masa total de  $(5-10)\cdot 10^6 M_{\odot}$ . Según estos autores, la pequeña diferencia entre la masa del complejo y la que se obtiene al suponer virialización,  $M_{virial} = (9-16)\cdot 10^6 M_{\odot}$ , y el hecho de que la densidad promedio del gas esté demasiado próxima al límite proporcionado por la presencia de fuerzas de marea, sugiere que todo el complejo se encuentra “más” gravitacionalmente ligado que otras nubes moleculares pertenecientes al CG pero de menores dimensiones. En la FIG. 3.9 se muestra un mapa de la línea  $J=3-2$  de  $C^{18}O$ . La poca correlación existente entre la emisión extensa de  $HC_3N$  y CO, sugiere que tanto las condensaciones centrales como la envoltura están notablemente fragmentadas y dominadas por numerosas condensaciones (Lis & Goldsmith 1991). Además, el perfil de densidades obtenido ajustando las observaciones de CO se refiere a un promedio de densidades sobre una única nube, cuando los estudios espectroscópicos muestran, al menos, 2 o 3 nubes de diferentes velocidades radiales asociadas a Sgr B2 (de Vicente *et al.* 1997).

Probablemente, la propiedad más sobresaliente de la envoltura de Sgr B2 es que a pesar de su baja densidad ( $n(H_2) < 10^4 \text{ cm}^{-3}$ ) y temperatura del polvo ( $T_{\text{polvo}} \simeq 20 \text{ K}$ ), existe una fracción considerable de  $H_2O$ , OH (esta tesis) y amoníaco caliente ( $T_k \geq 200 \text{ K}$ ) similar a la encontrada en otras nubes del CG (Hüttemeister *et al.* 1993b). Estas temperaturas han podido estimarse a través de la absorción producida por líneas metaestables desde niveles con energía de hasta 2000 K sobre el nivel fundamental (Wilson *et al.* 1982; Hüttemeister *et al.* 1995). Con alta resolución espacial ( $3''$ ), la morfología del  $NH_3$  caliente en la envoltura aparece dominada por burbujas de gas en expansión, anillos, arcos y filamentos (Martín-Pintado *et al.* 1999).

### MECANISMOS DE CALENTAMIENTO EN LA ENVOLTURA

A diferencia de los núcleos calientes donde la elevada densidad hace que los granos de polvo calentados por el campo de radiación UV estelar transfieran parte de su energía al gas mediante colisiones, la temperatura del polvo en la envoltura de Sgr B2 es un factor 2–10 veces más baja que la temperatura cinética del gas. Claramente, gas y polvo están térmicamente desacoplados y se requieren otros mecanismos que puedan explicar las condiciones físicas encontradas. Sin embargo, estos mecanismos siguen sin estar completamente establecidos, buscándose muchas veces un paralelismo con aquellos responsables de la fracción de gas caliente observada en el resto de nubes moleculares del CG.

El calentamiento por rayos cósmicos fue uno de los primeros mecanismos propuestos para explicar las altas temperaturas del gas molecular en el CG (*p.ej.*, Gusten *et al.* 1981). Sólo con un flujo de rayos cósmicos dos ordenes de magnitud superior al flujo local, se podría explicar el calentamiento del gas hasta temperaturas de  $\sim 100 \text{ K}$ .

Debido a la considerable anchura de las líneas moleculares, se ha propuesto también que la disipación de turbulencia supersónica sea la responsable de calentamiento de las nubes del CG y del gas en la envoltura de Sgr B2 (*p.ej.*, Wilson *et al.* 1982). Este mecanismo consigue reproducir las diferencias observadas entre las temperaturas del polvo y del gas, pero traslada el problema a encontrar el origen de dicha turbulencia.

Dentro de los mecanismos mecánicos, también se espera que se produzcan frentes de choques que además de calentar el gas, influyan en las abundancias del gas molecular. Los mapas de SiO en el CG, muestran que su emisión es extensa y con líneas particularmente anchas en toda la envoltura de Sgr B2 (Martín-Pintado *et al.* 1997). En el disco galáctico, este tipo de emisión sólo se da en flujos moleculares asociados a estrellas jóvenes (masivas o no) y choques muy localizados, lo que sugiere la presencia de choques en Sgr B2. Anteriormente se había propuesto que los choques podían proporcionar un mecanismo efectivo para liberar el amoníaco adherido a la superficie de los granos y aumentar su abundancia en fase gaseosa hasta los valores observados en la envoltura de Sgr B2 (Hüttemeister *et al.* 1995). El mismo mecanismo calienta el gas de baja densidad,  $n(H_2) \simeq 10^3 \text{ cm}^{-3}$ , a temperaturas de  $T_k = 500 \text{ K}$  (Flower *et al.* 1995).

Los choques pueden ser producidos constantemente por la expansión de burbujas de material formadas por la expansión de regiones HII (Soufe 1990) o por los vientos estelares procedentes de estrellas evolucionadas (Martín-Pintado *et al.* 1999). En numerosos trabajos se propone también un escenario donde tanto la formación estelar como la turbulencia del gas y choques en la envoltura de Sgr B2 son consecuencia de un único evento de colisión entre dos nubes moleculares (Mehringer *et al.* 1993; Hasegawa *et al.* 1994; Sato *et al.* 2000). Según estos autores, la forma alargada en que se distribuyen las regiones HII UC y los máseres moleculares, son el resultado de la compresión de las fronteras de ambas nubes.

Otro mecanismo propuesto para el CG en su conjunto pero aplicable a la envoltura de Sgr B2 es el calentamiento por rayos-X (*p.ej.*, Morris *et al.* 1983). Sin embargo, aún existen pocos estudios de la interacción entre el gas neutro y los rayos-X. Recientemente se ha encontrado una correlación entre la emisión de SiO y la emisión en la línea de Fe a 6.4 keV en nubes del CG que incluyen a Sgr B2, sugiriendo que las mismas fuentes de rayos-X podrían ser precursoras de frentes de choques (Martín-Pintado *et al.* 2000). En cualquier caso, el conocimiento que se tiene sobre el efecto de los rayos-X en la química y en el calentamiento de las nubes moleculares es limitado, y se necesitan más trabajos que cuantifiquen su importancia.

Los efectos derivados del calentamiento por radiación UV y subsecuente formación de PDRs en la frontera entre el gas ionizado y el gas neutro en un medio tan inhomogéneo como el CG han sido poco estudiados porque la mayoría de las líneas de estructura fina, diagnósticos de estas regiones, aparecen en el IR-medio y -lejano. En esta tesis se analizan precisamente los efectos a gran escala de la radiación en un medio, la *envoltura* de Sgr B2, suficientemente complejo para que coexistan diferentes mecanismos que calienten el gas. Primeramente, se deriva de forma precisa la temperatura del gas mediante trazadores más relacionados con los efectos del campo UV en las capas más externas de la nube. Para ello, se utilizan métodos de transferencia de radiación más sofisticados que aquellos utilizados con el diagnóstico tradicional, NH<sub>3</sub>.

### 3.2.5 LAS NUBES DIFUSAS EN LA LÍNEA DE MIRADA

Las observaciones de ciertas especies moleculares en la dirección de Sgr B2 muestran diferentes picos en absorción a velocidades más negativas ( $V_{LSR} \simeq -120$  a  $+20$  km s<sup>-1</sup>) que aquellas asociadas dinámicamente a la nube de Sgr B2 ( $V_{LSR} \simeq +20$  a  $+120$  km s<sup>-1</sup>). Las distintas componentes aparecen a velocidades discretas separadas unas de otras. Por ejemplo, la absorción de CS muestra 17 componentes diferentes en la línea de mirada para velocidades  $V_{LSR} < +30$  km s<sup>-1</sup> (Greaves & Williams 1994). Las anchuras observadas de cada componente son estrechas (1–10 km s<sup>-1</sup>), indicando que la absorción es producida por nubes diferentes distribuidas en la línea de mirada. Estas nubes no tienen ninguna conexión física con Sgr B2, pertenecen a las nubes moleculares asociadas a los distintos *brazos espirales* de la Galaxia que existen entre nosotros y el CG, y a las nubes más difusas del gas *inter-brazos* (Vallée 2002).

Debido al potencial galáctico barrado (SEC. 3.1.2), el gas en la Galaxia gira alrededor del bulbo central en órbitas que se desvían de un movimiento circular (Binney *et al.* 1991). La velocidad radial observada de las nubes en la línea de mirada hacia Sgr B2 es intermedia entre las velocidades de la barra y aquellas de Sgr B2. En la FIG. 3.10 se muestra un esquema de las distintas componentes y velocidades LSR que contribuyen en dicha línea de mirada.

Las “*nubes de los brazos espirales*” tienen densidades promedio de  $n(H_2) \simeq 200$  cm<sup>-3</sup>, aunque existe material más denso de hasta  $\sim 10^4$  cm<sup>-3</sup> (Greaves 1995). Estas nubes difusas son generalmente frías, con temperaturas  $T_k \leq 25$  K (Batra *et al.* 1984). En algunas regiones más próximas al CG, se miden temperaturas cinéticas de hasta  $\sim 70$  K (Tieftrunk *et al.* 1994). Estos indicadores sugieren que no albergan estrellas en su interior o bien que la formación estelar no ha comenzado aún. Gran parte del calentamiento y de la química está controlado por el campo de radiación interestelar, ( $G_0 = 1 - 10$ ; en unidades  $1.6 \cdot 10^{-3}$  erg s<sup>-1</sup> del flujo interestelar estándar, Habing 1968). Por tanto, la estructura de estas nubes es similar a la estudiada en otras regiones dominadas por la fotodisociación de moléculas (*p.ej.*, Tielens & Hollenbach 1985).

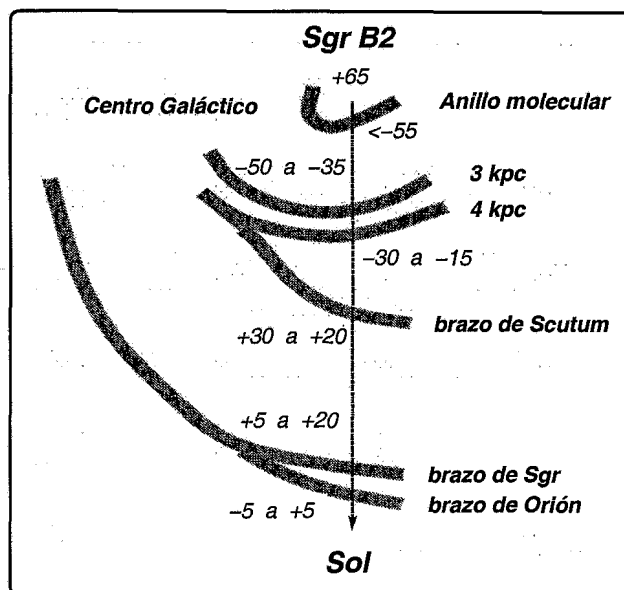


FIGURA 3.10: Esquema del plano galáctico en la línea de mirada hacia Sgr B2. Las dimensiones no están a escala. Se muestra la posición propuesta para las nubes situadas enfrente de Sgr B2 y sus velocidades LSR (en  $\text{km s}^{-1}$ ). (Adaptado de Vastel et al. 2002).

La radiación UV provoca la fotodisociación de las moléculas en las capas más externas de la nube, creando un *halo* de material fundamentalmente atómico ( $\text{H}^0$ ,  $\text{C}^+$ , ...), mientras que el aumento de la densidad de columna de  $\text{H}_2$  y consecuente debilitamiento del campo UV hacia el interior de la nube permite la formación y subsistencia de otras especies moleculares más complejas. Las temperaturas de excitación de las moléculas detectadas en estas nubes están próximas a los 2.73 K del fondo de radiación cósmica. Esto permite la observación de estas especies en el espectro de absorción de fuentes de continuo tan intensas como Sgr B2. Algunas especies detectadas son:  $\text{HCO}^+$ , HCN, HNC, CN, CCH, CS, SiO,  $\text{N}_2\text{H}^+$ ,  $\text{CH}_3\text{OH}$ , SO,  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{H}_2\text{CO}$  (p.ej., Greaves & Nyman 1996). En este trabajo se presenta la absorción producida por estas nubes en las líneas fundamentales de  $\text{H}_2\text{O}$ , OH, CH o  $\text{H}_3\text{O}^+$ , cuyas transiciones rotacionales aparecen a longitudes de onda en el IR-lejano o en submilimétricas.

### 3.3 RESUMEN

El CG representa el 0.1% del volumen de la Galaxia, sin embargo contribuye con el 10% del contenido molecular total. La mayoría de las propiedades físicas del ISM en el CG parecen estar determinadas por la respuesta del material a un potencial barrado. En comparación con el DG, las especiales características del CG son: las fuertes fuerzas de marea existentes; la elevada metalicidad e inusuales abundancias químicas; los fuertes campos magnéticos; así como las altas temperaturas, densidades y turbulencia del gas. Estas condiciones ambientales globales inhiben la formación estelar salvo en ciertas regiones de la ZMC como Sgr B2 o Sgr C, donde las tasas de formación estelar son similares a las DG. En estas nubes parece que los mecanismos de formación estelar dominantes favorecen la formación de estrellas masivas (choques a gran escala entre nubes moleculares).

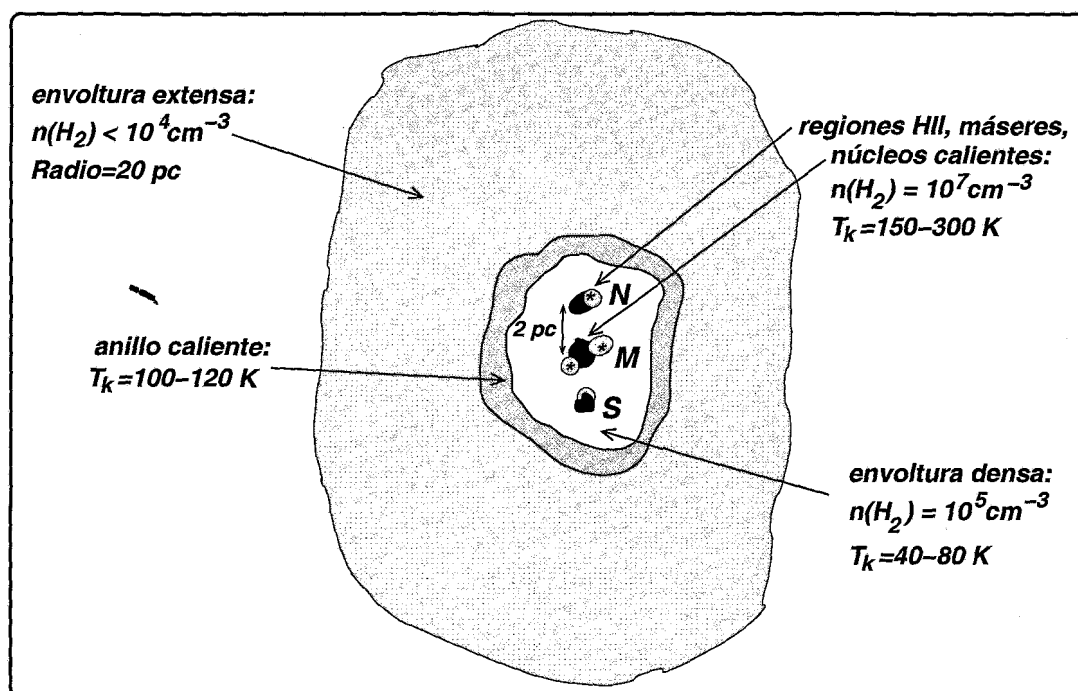


FIGURA 3.11: Esquema resumen de las diferentes estructuras y componentes en Sgr B2. Los núcleos calientes y densos aparecen sombreados en negro. Las regiones HII son las estructuras que rodean a las estrellas. Las dimensiones no están a escala.

En la primera parte de la tesis (CAP. 4 y CAP. 5) se lleva a cabo el primer estudio de Sgr B2 en el rango continuo del IR-lejano comprendido entre 43 y 197  $\mu\text{m}$ . Sgr B2 es la nube molecular conocida más masiva de la Galaxia y uno de mayores brotes de formación estelar reciente de estrellas masivas que se conoce en la Galaxia. Sgr B2 está situado a una distancia proyectada de unos 100 pc del centro dinámico de la galaxia y constituye la fuente más brillante de la ZMC ( $L \simeq 10^7 L_{\odot}$ ). Las principales componentes y estructuras de Sgr B2 son (FIG. 3.11):

- Los núcleos calientes ( $T_k=150-300$  K) y densos ( $n(\text{H}_2) \simeq 10^7 \text{ cm}^{-2}$ ) donde tiene lugar la primera fase en la evolución de proto-estrellas rodeadas de envolturas de polvo.
- Las regiones HII UC generadas por el flujo UV de las estrellas OB recién formadas. Se contabilizan  $\sim 60$  regiones HII UC que producen un flujo de fotones Lyman de  $10^{50.3} \text{ s}^{-1}$ .
- Una nube ambiente de gas denso ( $n(\text{H}_2)=10^{5-6} \text{ cm}^{-2}$ ) con un tamaño de  $\sim 10$  pc que envuelve a las anteriores regiones de formación estelar.

Todo este medio altamente fragmentado y rico en condensaciones de diferentes características cinemáticas y fisicoquímicas se encuentra envuelto en una nube molecular gigante ( $\sim 15'$ ) cuyas propiedades físicas, contenido y abundancias moleculares, y fuentes de energía son mucho menos conocidas. A lo largo de este trabajo se presentarán diversas técnicas basadas en el análisis del espectro en el IR-lejano para profundizar en el conocimiento de estos tres aspectos.

## Capítulo 4

# Espectroscopia molecular en la envoltura de Sgr B2(M)

En este capítulo se presenta un análisis detallado del espectro de Sgr B2(M) en el IR-lejano con la máxima resolución posible del instrumento LWS/Fabry-Perot ( $\sim 35 \text{ km s}^{-1}$ ). Este *survey* espectral constituye una herramienta única para el estudio de Sgr B2, y también del ISM en el CG, en un rango espectral atenuado por la opacidad atmosférica y de transmisión prácticamente nula. Las observaciones espaciales con *ISO* han permitido, por primera vez, realizar espectroscopia molecular en el IR-lejano con suficiente resolución espectral. Aunque la densidad de líneas en el rango continuo que ofrece el LWS ( $43\text{--}197 \mu\text{m}$ ) no es tan elevada como en la región milimétrica, la identificación y análisis de las posibles especies moleculares presentes no es sencilla. Sin embargo, el potencial de las observaciones en ventanas espectrales, que como el IR-lejano están casi inexploradas, ofrece la posibilidad de detectar nuevas especies moleculares en el espacio, utilizar diferentes trazadores de las condiciones del ISM y poder estudiar regiones tan oscurecidas como las del CG. La gran mayoría de las líneas detectadas hacia Sgr B2(M) y utilizadas como diagnóstico de la extensa envoltura del complejo son *primeras detecciones* en el espacio. Este capítulo se centra en  $\text{H}_3\text{O}^+$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{OH}$  y  $\text{C}_3$ , mientras que en el capítulo siguiente se estudian especies moleculares como  $\text{CH}$ ,  $\text{NH}$  o  $\text{NH}_2$ , así como el gas ionizado a gran escala trazado por  $\text{O}^0$ ,  $\text{C}^+$ ,  $\text{N}^+$ ,  $\text{N}^{++}$  y  $\text{O}^{++}$ .

### 4.1 EL ESPECTRO ISO/LWS DE SGR B2(M)

La FIG. 4.1 muestra el espectro LWS/grating de baja resolución ( $\sim 1000 \text{ km s}^{-1}$ ) y las principales detecciones realizadas con el Fabry-Perot (FP) a más alta resolución ( $\sim 35 \text{ km s}^{-1}$ ). El espectro en el IR-lejano de Sgr B2(M) está dominado por la elevadísima emisión del continuo, cuyo máximo de emisión tiene lugar a  $\sim 80 \mu\text{m}$  (con una densidad de flujo de  $\sim 28000 \text{ Jy}$ ). Las líneas espectrales detectadas en Sgr B2 pueden clasificarse en:

- **Líneas rotacionales** de moléculas ricas en *oxígeno* como  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{17}\text{O}$ ,  $\text{OH}$ ,  $^{18}\text{OH}$ ,  $^{17}\text{OH}$  y  $\text{H}_3\text{O}^+$ ; en *nitrógeno* como  $\text{NH}$ ,  $\text{NH}_2$  y  $\text{NH}_3$ ; y otras especies como  $\text{CH}$ ,  $\text{HD}$  o  $\text{HF}$ .
- **Bandas vibracionales** de modos *flexión* de baja energía de cadenas lineales de carbono no-polares como  $\text{C}_3$ ,  $\text{C}_4$ , ...  $\text{C}_n$ .
- **Líneas de estructura fina** de átomos e iones como  $[\text{OI}]$ ,  $[\text{CII}]$ ,  $[\text{NII}]$ ,  $[\text{NIII}]$  o  $[\text{OIII}]$ .

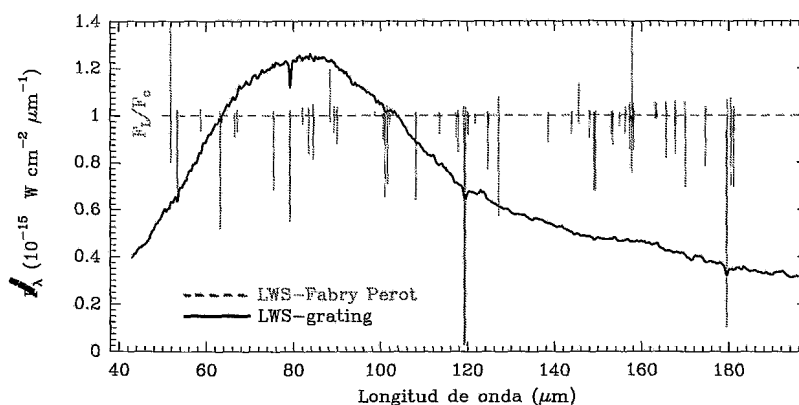


FIGURA 4.1: Espectro LWS/grating de Sgr B2(M) ( $\alpha=17^h 44^m 10.61^s$ ,  $\delta=-28^\circ 22' 30.0''$  [J1950]) entre 43 y 197  $\mu\text{m}$  y principales detecciones con LWS/FP (ver FIG. 4.2 y TABLAS 4.1 y 4.2). La ordenada es válida para los espectro grating (en  $\text{W cm}^{-2}\mu\text{m}^{-1}$ ) y para el FP (en  $F_L/F_c$ ).

Se han identificado más de 70 líneas procedentes de 15 especies moleculares y atómicas. La mayoría de las líneas moleculares detectadas (ver FIG. 4.2) aparecen en absorción, lo que ya indica que el gas trazado por las observaciones en el IR-lejano está situado *delante* de las fuentes de continuo. En número de líneas domina la absorción producida por OH,  $\text{NH}_3$  y  $\text{H}_2\text{O}$ , lo que además sugiere que son las especies moleculares más abundantes. La mayoría de los estudios del gas neutro de la envoltura de Sgr B2 han sido realizados analizando la absorción de  $\text{NH}_3$  (Wilson *et al.* 1982; Hüttemeister *et al.* 1995; Martín-Pintado *et al.* 1999; Ceccarelli *et al.* 2002). Es posible que debido a las especiales condiciones de formación del amoniaco (relacionada con los granos de polvo) y a sus condiciones de supervivencia (poco resistente a la fotodisociación), estos trabajos sean sólo sensibles a un tipo de condiciones específicas para la química del  $\text{NH}_3$ . Además, el análisis de la transferencia de radiación en estos estudios se simplifica asumiendo que la aproximación LVG se cumple, o incluso se supone ETL en la población de niveles.

El análisis riguroso de la transferencia de la radiación de los nuevos trazadores moleculares utilizados en este trabajo, tiene en cuenta los fenómenos no-locales, el recubrimiento entre líneas y los efectos del intenso continuo producido por la emisión del polvo.

### EL ESPECTRO LWS/FP DE SGR B2(M)

La mayoría de las líneas detectadas en la FIG. 4.2 han sido observadas en nuestras propuestas de observación con ISO en el modo de observación AOT LWS L04 (ver SEC. 1.3). Los TDTs que los identifican son: 32201429, 32201428, 32701751, 47600909, 47600908, 47600907, 47601002, 47601001, 46900332. Sin embargo, también se ha realizado un intensa inspección y reducción de otros  $\sim 50$  TDTs<sup>1</sup> procedentes del Archivo de Datos de ISO (IDA), que es público desde 1999. Con el complemento de estas observaciones se han podido analizar nuevas líneas y se han promediado todas las observaciones existentes de una misma línea. En particular, se han promediado algunas observaciones procedentes del modo AOT LWS L03 (Polehampton 2002). En las TABLAS 4.1 y 4.2 se presenta el conjunto de líneas publicadas, las transiciones moleculares o de estructura fina asociadas y los trabajos en los que se discuten.

<sup>1</sup>Las observaciones AOT L04 adicionales fueron realizadas por ISO durante las órbitas: 498, 494, 467, 464, 462, 326, 327, 326, y 322, mientras que las observaciones AOT L03 fueron realizadas durante las órbitas: 849, 847, 845, 838, 836, 509, 508, 507, 506, 504 y 476.



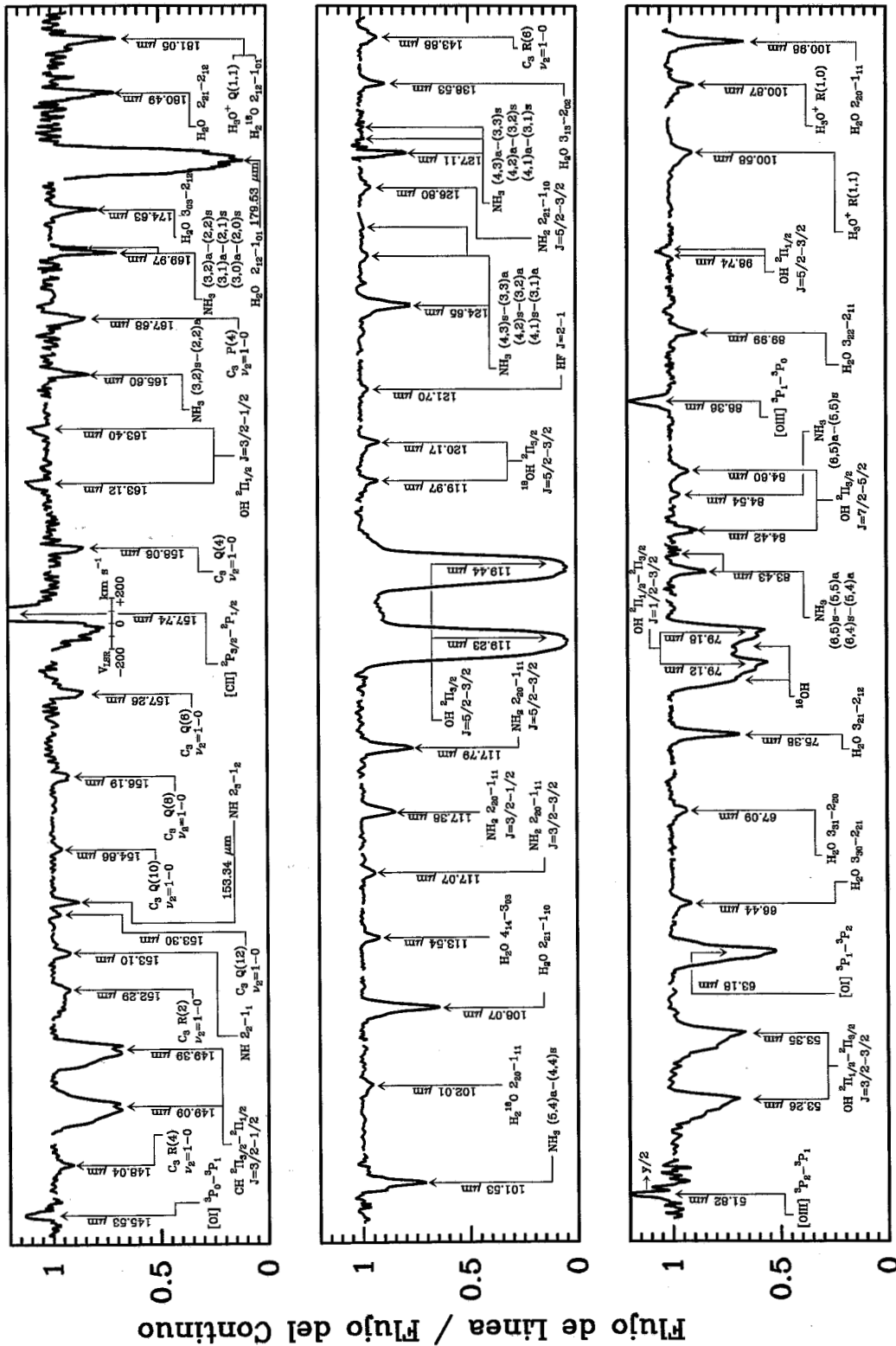


FIGURA 4.2: Líneas detectadas con el LWS/FP en Sgr B2(M). La resolución en velocidad es de  $\sim 35 \text{ km s}^{-1}$ . Notar la discontinuidad del espectro después de cada línea. Algunas líneas débiles permanecen sin identificar (no se muestran en la figura). Algunas de las líneas han sido discutidas en otros trabajos (ver TABLAS 4.1 y 4.2 y bibliografía).

TABLA 4.1: Líneas detectadas con LWS/FP en Sgr B2(M) entre 181.1–119.6  $\mu\text{m}$ .

especie	transición	$\lambda_{\text{reposo}} (\mu\text{m})$	referencias
$\text{H}_3\text{O}^+$	$1_1^- - 1_1^+$	181.05	(5)
$\text{H}_2^{18}\text{O}$	$2_{12} - 1_{01}$	181.05	(2),(5),(11)
$\text{H}_2\text{O}$	$2_{21} - 2_{12}$	180.49	(11)
$\text{H}_2\text{O}$	$2_{12} - 1_{01}$	179.53	(2),(11)
$\text{H}_2\text{O}$	$3_{03} - 2_{12}$	174.63	(2),(11)
$\text{NH}_3$	$(3,2)a - (2,2)s$	169.97	(7)
$\text{C}_3$	$P(4) \nu_2 = 1 - 0$	167.68	(4)
$\text{NH}_3$	$(3,2)s - (2,2)a$	165.60	(7)
$\text{OH}$	$^2\Pi_{1/2} J = 3/2^- - 1/2^+$	163.40	(8)
$\text{OH}$	$^2\Pi_{1/2} J = 3/2^+ - 1/2^-$	163.12	(8)
$\text{C}_3$	$Q(4) \nu_2 = 1 - 0$	158.06	(4)
$\text{C}^+$	$^2P_{3/2} - ^2P_{1/2}$	157.74	(1),(10)
$\text{C}_3$	$Q(6) \nu_2 = 1 - 0$	157.26	(4)
$\text{H}_2\text{O}$	$3_{22} - 3_{13}$	156.19	(11)
$\text{C}_3$	$Q(8) \nu_2 = 1 - 0$	156.19	(4)
$\text{C}_3$	$Q(10) \nu_2 = 1 - 0$	154.86	(4)
$\text{NH}$	$2_3 - 1_2$	153.34	(4)
$\text{C}_3$	$Q(12) \nu_2 = 1 - 0$	153.30	(4)
$\text{NH}$	$2_2 - 1_1$	153.10	(1)
$\text{C}_3$	$R(2) \nu_2 = 1 - 0$	152.29	(4)
$\text{CH}$	$^2\Pi_{3/2} - ^2\Pi_{1/2} J = 3/2^- - 1/2^+$	149.39	(1),(13)
$\text{CH}$	$^2\Pi_{3/2} - ^2\Pi_{1/2} J = 3/2^+ - 1/2^-$	149.09	(1),(13)
$\text{C}_3$	$R(4) \nu_2 = 1 - 0$	148.04	(4)
$\text{O}^0$	$^3P_0 - ^3P_1$	145.53	(1),(10)
$\text{C}_3$	$R(6) \nu_2 = 1 - 0$	143.88	(4)
$\text{H}_2\text{O}$	$3_{13} - 2_{02}$	138.53	(11)
$\text{NH}_3$	$(4,3)a - (3,3)s$	127.11	(7)
$\text{NH}_2$	$2_{21} - 1_{10} J = 5/2 - 3/2$	126.80	(1)
$\text{NH}_3$	$(4,2)s - (3,2)a$	124.80	(7)
$\text{NH}_3$	$(4,3)s - (3,3)a$	124.65	(7)
$\text{HF}$	$J = 2 - 1$	121.70	(3)
$^{18}\text{OH}$	$^2\Pi_{3/2} J = 5/2^+ - 3/2^-$	120.17	(8),(14)
$^{18}\text{OH}$	$^2\Pi_{3/2} J = 5/2^- - 3/2^+$	119.97	(8),(14)
$^{17}\text{OH}$	$^2\Pi_{3/2} J = 5/2^+ - 3/2^-$	119.83	(12)
$^{17}\text{OH}$	$^2\Pi_{3/2} J = 5/2^- - 3/2^+$	119.62	(12)

TABLA 4.2: Líneas detectadas con LWS/FP en Sgr B2(M) entre 119.4–51.8  $\mu\text{m}$ .

especie	transición	$\lambda_{\text{reposo}} (\mu\text{m})$	referencias
OH	${}^2\Pi_{3/2} J = 5/2^+ - 3/2^-$	119.44	(2),(8),(15)
OH	${}^2\Pi_{3/2} J = 5/2^- - 3/2^+$	119.23	(8),(15)
NH <sub>2</sub>	$2_{20} - 1_{11} J = 5/2 - 3/2$	117.79	(1)
NH <sub>2</sub>	$2_{20} - 1_{11} J = 3/2 - 1/2$	117.38	(1)
NH <sub>2</sub>	$2_{20} - 1_{11} J = 3/2 - 3/2$	117.07	(1)
H <sub>2</sub> O	$4_{14} - 3_{03}$	113.54	(11)
HD	$J = 1 - 0$	112.07	(9)
H <sub>2</sub> O	$2_{21} - 1_{10}$	108.07	(11)
H <sub>2</sub> <sup>18</sup> O	$2_{20} - 1_{11}$	102.01	(11)
NH <sub>3</sub>	$(5,4)a - (4,4)s$	101.53	(7)
H <sub>2</sub> O	$2_{20} - 1_{11}$	100.98	(5), (11)
H <sub>3</sub> O <sup>+</sup>	$2_0^- - 1_0^+$	100.87	(5)
H <sub>3</sub> O <sup>+</sup>	$2_1^- - 1_1^+$	100.58	(5)
NH <sub>3</sub>	$(5,3)s - (4,3)a$	100.11	(7)
NH <sub>3</sub>	$(5,4)s - (4,4)a$	99.95	(7)
OH	${}^2\Pi_{1/2} 5/2 - 3/2$	98.74	(8)
H <sub>2</sub> O	$3_{22} - 2_{11}$	89.99	(11)
O <sup>++</sup>	${}^3P_1 - {}^3P_0$	88.36	(1)
OH	${}^2\Pi_{3/2} J = 7/2^- - 5/2^+$	84.60	(2),(8)
NH <sub>3</sub>	$(6,5)a - (5,5)s$	84.54	(7),(8)
OH	${}^2\Pi_{3/2} J = 7/2^+ - 5/2^-$	84.42	(8)
NH <sub>3</sub>	$(6,5)s - (5,5)a$	83.43	(7)
OH	${}^2\Pi_{1/2} - {}^2\Pi_{3/2} J = 1/2^+ - 3/2^-$	79.18	(8)
OH	${}^2\Pi_{1/2} - {}^2\Pi_{3/2} J = 1/2^- - 3/2^+$	79.12	(8)
H <sub>2</sub> O	$3_{21} - 2_{12}$	75.38	(11)
NH <sub>3</sub>	$(7,6)a - (6,6)s$	72.44	(7)
NH <sub>3</sub>	$(7,6)s - (6,6)a$	71.61	(7)
H <sub>2</sub> O	$3_{31} - 2_{20}$	67.09	(11)
H <sub>2</sub> O	$3_{30} - 2_{21}$	66.44	(11)
NH <sub>3</sub>	$(8,7)a - (7,7)s$	63.38	(7)
O <sup>0</sup>	${}^3P_1 - {}^3P_2$	63.18	(6),(10)
NH <sub>3</sub>	$(8,7)s - (7,7)a$	62.73	(7)
NH <sub>3</sub>	$(9,8)a - (8,8)s$	56.34	(7)
OH	${}^2\Pi_{1/2} - {}^2\Pi_{3/2} J = 3/2^- - 3/2^+$	53.35	(8)
OH	${}^2\Pi_{1/2} - {}^2\Pi_{3/2} J = 3/2^+ - 3/2^-$	53.26	(8)
O <sup>++</sup>	${}^3P_2 - {}^3P_1$	51.82	(1)

TABLA 4.3: Referencias a las líneas detectadas con LWS/FP en Sgr B2(M).

referencia	
Goicoechea, Rodríguez-Fernández & Cernicharo 2003	(1)
Cernicharo, Lim, Cox, <i>et al.</i> 1997a	(2)
Neufeld, Zmuidzinas, Schilke, & Phillips 1997	(3)
Cernicharo, Goicoechea, & Caux 2000	(4)
Goicoechea & Cernicharo 2001	(5)
Lis, Keene, Schilke, Werner, & Zmuidzinas 2001b	(6)
Ceccarelli, Baluteau, Walmsley, <i>et al.</i> 2002	(7)
Goicoechea & Cernicharo 2002	(8)
Polehampton, Baluteau, Ceccarelli, <i>et al.</i> 2002	(9)
Vastel, Polehampton, Baluteau, <i>et al.</i> 2002	(10)
Cernicharo, Goicoechea, Pardo <i>et al.</i> 2003	(11)
Polehampton, Brown, Swinyard, Baluteau 2003	(12)
Stacey, Lugten & Genzel 1987 (observado con KAO)	(13)
Lugten, Stacey & Genzel 1986 (observado con KAO)	(14)
Storey, Watson & Townes 1981 (observado con KAO)	(15)

La referencia completa a estos trabajos se encuentra en la Bibliografía.

La estructura del capítulo es como sigue:

- En la SEC. 4.2 se presentan y analizan las observaciones del continuo en el IR-lejano de Sgr B2(M). Este tipo de observaciones permite estudiar la emisión del polvo en la envoltura del complejo en un rango continuo de longitudes de onda.
- En la SEC. 4.3 se presenta la primera detección de  $\text{H}_3\text{O}^+$  en el IR-lejano. Este ion molecular es la especie progenitora de OH y  $\text{H}_2\text{O}$  y su detección ayuda a comprender los mecanismos de formación de estas importantes especies para la química del oxígeno.
- En la SEC. 4.4 se realiza un estudio de la absorción de  $\text{H}_2\text{O}$ . El número de líneas detectadas permite determinar las condiciones físicas de la envoltura de Sgr B2 así como acotar el valor de la abundancia de  $\text{H}_2\text{O}$ , parámetro fundamental en las regiones de formación estelar.
- En la SEC. 4.5 se realiza un estudio de la absorción rotacional de OH equivalente al realizado para  $\text{H}_2\text{O}$ . Esta especie es mucho más sensible a las condiciones físicas de la frontera externa de la nube, donde precisamente domina la fotodisciación del agua.
- Finalmente en la SEC. 4.6 se analiza la primera detección de  $\text{C}_3$  en el ISM. Su presencia había sido demostrada sólo en las envolturas circunestelares de estrellas evolucionadas. Esta detección ha abierto la posibilidad de detectar otras moléculas simétricas sin momento dipolar a través de sus movimientos de vibración de baja energía.

## 4.2 LA EMISIÓN DEL POLVO

Antes de analizar el contenido molecular de Sgr B2(M) se presenta en esta sección un análisis de las observaciones del continuo en el IR-lejano producido por la emisión del polvo en las regiones más externas de la nube. Los granos de polvo están calentados por el campo de radiación interestelar o por el procedente de las estrellas recién formadas. La determinación de la opacidad del continuo y la temperatura del polvo es determinante para el cálculo del espectro emergente de una nube molecular en el IR-lejano porque estos parámetros influyen en la población de los niveles moleculares y en la transferencia de la radiación. Además, la elevada densidad de columna de polvo presente hacia el CG y en la propia Sgr B2 provocan una fuerte extinción de la fuente incluso en el IR-medio, de hecho, el flujo de la región es prácticamente nulo por debajo de  $\sim 20 \mu\text{m}$ .

### 4.2.1 INTRODUCCIÓN

Aproximadamente un 1% de la masa en el ISM está en forma de granos de polvo sólidos, con dimensiones típicas de  $0.1\text{--}0.01 \mu\text{m}$ . Su principal componente son las especies refractarias como el grafito o los silicatos dependiendo del cociente C/O de la zona donde se formaron (Mathis *et al.* 1977). La preponderancia del material amorfo sobre el cristalino hace pensar que los granos de polvo sufren un procesamiento rápido, producido probablemente por la acción de los rayos cósmicos (Demyk *et al.* 1999). En regiones moleculares densas donde el polvo está más protegido de los fotones UV, los granos están recubiertos por mantos de hielo. En particular, el material refractario proporciona un núcleo natural donde especies volátiles como el  $\text{H}_2\text{O}$  o  $\text{NH}_3$  pueden condensarse y acumularse (TABLA 4.4). La formación de nuevas especies moleculares mediante catálisis superficial en los granos de polvo es un eficiente mecanismo de formación de moléculas a tener en cuenta además de los mecanismos clásicos que operan en fase gaseosa.

La caracterización espectroscópica de estas especies sólidas se realiza analizando sus modos de vibración en el IR-cercano y -medio. Las especies dominantes en los mantos de hielo del CG son:  $\text{H}_2\text{O}$  (a  $3.0$  y  $6.0 \mu\text{m}$ ),  $\text{NH}_3$  (a  $2.95 \mu\text{m}$ ),  $\text{CO}_2$  (a  $4.27 \mu\text{m}$ ),  $\text{CH}_3\text{OH}$  (a  $3.54 \mu\text{m}$ ),  $\text{CO}$  (a  $4.65 \mu\text{m}$ ) y  $\text{CH}_4$  (a  $3.32 \mu\text{m}$ ). También se han caracterizado las absorciones producidas por el polvo formado por carbono hidrogenado (a  $3.34$ ,  $6.86$  y  $7.25 \mu\text{m}$ ) en las nubes difusas de la línea de mirada (Chiar *et al.* 2000). Una de las conclusiones más importantes en lo referente a las nubes en la línea de mirada hacia el CG, es la gran proporción de agua que se encuentra congelada sobre las superficies de los granos de polvo (*p.ej.*, Moneti *et al.* 2001).

Los modelos teóricos del polvo tienen que explicar la forma y tamaño de las partículas, la composición química, las propiedades de extinción y polarización así como las de absorción y emisión de fotones. En esta sección sólo interesan en las propiedades emisoras del polvo en el IR-lejano. Estas se determinan evaluando las características de la radiación electromagnética dispersada por los granos de polvo. La forma geométrica del grano tiene influencia sobre los efectos de difracción de la partícula material, pudiendo incluso polarizar la radiación dispersada. La composición química por su parte, determina las propiedades dieléctricas del material que forma el grano. El marco teórico para este estudio lo proporciona la "Teoría de Mie", cuyo objetivo es calcular los factores de eficiencia para los procesos de dispersión y absorción de fotones. La emisión del polvo se determina considerando que el único mecanismo efectivo de radiación de energía es la remisión térmica del sólido a una temperatura determinada ( $T_{\text{polvo}}$ ).

TABLA 4.4: Composición comparativa de los mantos de hielo en la galaxia.

Especie	Nubes del CG	Nubes del DG	Cometas
H <sub>2</sub> O	1	1	1
NH <sub>3</sub>	0.2–0.3	0.1	0.007
CO <sub>2</sub>	0.14	0.2	0.06
CO	<0.12	0.15	0.23
CH <sub>3</sub> OH	<0.04	0.07	0.02
CH <sub>4</sub>	0.02	0.02	0.006
HCOOH	0.06	0.03	0.001

Abundancias para las nubes moleculares Sgr A\*, NGC 7538 IRS9 y el cometa Hale-Bopp.  
Adaptada de Chiar *et al.* 2000 y van Dishoeck & Tielens 2001

#### 4.2.2 OBSERVACIONES

Las observaciones de la emisión de continuo del polvo en Sgr B2(M) fueron realizadas utilizando el instrumento LWS en su modo de operación grating LWS AOT L01 que proporciona el rango continuo entre 43 y 196.7  $\mu\text{m}$ . Las observaciones fueron realizadas en la órbita 287 de ISO (TDT 28701401). La resolución espectral en el rango 43–93  $\mu\text{m}$  es 0.29  $\mu\text{m}$  y 0.6  $\mu\text{m}$  en el rango 80–197  $\mu\text{m}$ . El tiempo de integración total fue de 2836 segundos y se registraron 16 *scans* en la posición central de Sgr B2,  $\alpha = 17^{\text{h}}44^{\text{m}}10^{\text{s}}.61$ ,  $\delta = -28^{\circ}22'30''$  [1950]. El espectro de la versión 9 de la IDA fue analizado con ISAP para eliminar efectos instrumentales y el patrón de interferencia sistemáticamente observado en los espectros LWS/grating de fuentes extensas o de fuentes puntuales desalineadas con el eje óptico del telescopio (Swinyard *et al.* 1996). La incertidumbre típica en la calibración del flujo varía entre el 10 y el 50% dependiendo de la geometría de la fuente, el flujo de la fuente y el detector LWS considerado (Gry *et al.* 2002). Los flujos de los detectores adyacentes se han llevado a un nivel común desplazando cada detector ( $\leq 10$  % del flujo del detector) para proporcionar un espectro continuo (FIG. 4.1). Para el análisis de la emisión del polvo sólo se ha promediado el flujo de cada detector sustrayendo primeramente las líneas espectrales intensas que aparecen en emisión/absorción (FIG. 4.3).

#### 4.2.3 MODELOS DE LA EMISIÓN DEL POLVO

En esta sección y en el próximo capítulo se obtienen estimaciones a la temperatura y opacidad del polvo mediante ajustes de la emisión del continuo basados en la adición de diferentes capas plano-paralelas con temperaturas uniformes en cada una de ellas (análisis de *cuerpos grises*). La absorción causada por el polvo interestelar es bastante uniforme y se relaciona casi linealmente con la densidad de columna de gas, sin embargo existe una fuente de incertidumbre considerable en la conversión de las opacidades del continuo a densidad de columna de polvo. Esta incertidumbre se debe a los errores en la determinación de la emisividad de los granos de polvo mediante los ajustes de cuerpos grises. Sin embargo, la temperatura del polvo en el IR-lejano es prácticamente independiente de la emisividad y su valor se puede acotar mejor.

En los ajustes de cuerpos grises se asume que las características de los granos de polvo que influyen en su emisividad, composición y tamaño, son en promedio iguales en cada punto. Además, se supone que el cociente másico polvo/gas es el mismo en escalas tan grandes como las de una nube molecular gigante y próximo a 0.5–1/100 (Gordon *et al.* 1995).

Las diferentes componentes de polvo dentro de la región encerrada por el haz del LWS ( $\Omega_{LWS} \simeq 80''$ ), y la elevada densidad de columna en la línea de mirada hacia Sgr B2(M), hacen que el análisis del polvo no sea sencillo. Aquí sólo se ha considerado un único *cuerpo gris* para extraer la temperatura promedio y la opacidad del continuo del polvo. El flujo total del continuo puede entonces escribirse como:

$$S_\lambda = B_\lambda(T_{polvo}) (1 - e^{-\tau_\lambda^{polvo}}) \Omega \quad (4.1)$$

donde  $B_\lambda(T_{polvo})$  es la *distribución de Planck* a la temperatura del polvo  $T_{polvo}$ ,  $\tau_\lambda^{polvo}$  es la opacidad del continuo y  $\Omega$  es el ángulo sólido subtendido por la componente que emite el polvo. La opacidad del continuo puede escribirse como:

$$\tau_\lambda^{polvo} = \tau_{ref}^{polvo} \left( \frac{Q_\lambda}{Q_{ref}} \right) \quad (4.2)$$

donde  $Q_\lambda$  es la emisividad del polvo y  $\tau_{ref}^{polvo}$  y  $Q_{ref}$  representan respectivamente la opacidad y la emisividad del polvo a una longitud de onda de  $\lambda_{ref}$  que se toma como referencia.

Aplicando la *ley de Kirchhoff* para la energía absorbida y remitida por un grano de polvo interestelar se deduce que  $Q_\lambda = Q_{abs}$ . Para el caso más sencillo de esferas dieléctricas de radio  $a = 0.1 - 0.01 \mu\text{m}$  e índice de refracción complejo dado por  $m(\lambda) = n(\lambda) + ik(\lambda)$ , se puede demostrar que en el límite  $2\pi a/\lambda < 1$  (se satisface en el IR-lejano), la eficiencia de absorción es (véase Hoyle & Wickramasinghe 1991):

$$Q_{abs} = \frac{8\pi a}{\lambda} \text{Im} \left( \frac{1 - m(\lambda)^2}{2 + m(\lambda)^2} \right) \quad (4.3)$$

En general, los cálculos de eficiencias de absorción se realizan para los materiales más comunes en los granos interestelares: grafito y silicatos. A partir de las relaciones de *Kramers-Kronig* para sólidos, Draine & Lee (1984) derivaron para estos dos materiales la constante dieléctrica compleja ( $\epsilon(\lambda) = m^2(\lambda)$ ) para longitudes de onda entre 0.1 y 1000  $\mu\text{m}$ . En este trabajo se utiliza como referencia la opacidad y eficiencia de absorción a  $\lambda = 100 \mu\text{m}$  ( $\tau_{100}$  y  $Q_{100}$ ).

En este régimen de longitudes de onda, los granos de polvo pueden caracterizarse por un índice de refracción complejo  $m(100 \mu\text{m}) \simeq 3 + 0.5i$ . Para esferas de radio  $a = 0.1 \mu\text{m}$  se obtiene un valor de  $Q_{100} \simeq 2 \cdot 10^{-3}$  que concuerda con los valores tabulados para los silicatos,  $Q_{100}^{silic}/a = 0.014$ , y el grafito,  $Q_{100}^{graf}/a = 0.019$  (Draine 1985).

Sin embargo, se sabe que los granos de polvo poseen diferentes tamaños y formas geométricas, pueden estar recubiertos por mantos de hielo y muchas de sus propiedades dieléctricas pueden depender de la temperatura y de la longitud de onda a la que se evalúen. Empíricamente se ha determinado que la emisividad de los granos se puede aproximar mediante una ley de potencias sencilla del tipo (Hildebrand 1983):

$$Q_\lambda = Q_{ref} \left( \frac{\lambda_{ref}}{\lambda} \right)^\beta \quad (4.4)$$

Esta expresión permite parametrizar la dependencia de cualquier parámetro que afecte a  $Q_\lambda$  con la longitud de onda. Por lo tanto, la opacidad  $\tau_\lambda^{polvo}$  en la EC. 4.2 puede escribirse como:

$$\tau_\lambda^{polvo} = \tau_{ref}^{polvo} \left( \frac{\lambda_{ref}}{\lambda} \right)^\beta \quad (4.5)$$

La mayoría de los análisis sencillos de la emisión del polvo utilizan este tipo de parametrizaciones para ajustar la emisión del continuo e inferir en primera aproximación las propiedades generales de los granos de polvo. En el CAP. 5 se hará uso de estos modelos simples (con dos componentes de diferente temperatura) para analizar la emisión del polvo en toda la región.

Considerando emisión extensa ( $\Omega = \Omega_{LWS}$ ) los mejores ajustes de las observaciones se obtienen para  $\beta \sim 1$ . Este exponente en la emisividad de los granos es similar al obtenido para el polvo difuso en otras regiones del CG (Lis & Menten 1998). La determinación precisa de  $\beta$  requiere un ajuste de la emisión del continuo también en el rango milimétrico donde la emisión es ópticamente delgada y más sensible a las variaciones de  $\beta$ . Sin embargo, este rango está dominado por la emisión del polvo caliente ( $T_{polvo} = 150\text{--}300\text{ K}$ ) procedente de las regiones de formación estelar situadas en el interior de Sgr B2(M), mientras que la emisión en el IR-lejano procede exclusivamente de la envoltura del complejo. La presencia de emisividades  $\beta > 2$  se asocia generalmente a la presencia de mantos de hielo que recubren la superficie de los granos de polvo (Goldsmith *et al.* 1997) en regiones frías y densas. Debido a la fotodestrucción de los mantos de hielo en regiones dominadas por un campo de radiación UV, las emisividades del polvo disminuyen por debajo de 2 (véase Lis *et al.* 1998 para el caso de Orión).

El mejor ajuste se obtiene para una temperatura  $T_{polvo} = 31 \pm 1\text{ K}$  y  $\tau_{100} = 3.8 \pm 0.4$ . La alta opacidad del continuo hace que esta emisión trace únicamente el polvo asociado a las regiones más externas del complejo, la envoltura de Sgr B2(M). El efecto de aumentar el exponente de la emisividad del polvo es disminuir ligeramente la temperatura pero se aumenta la opacidad del continuo y por tanto la cantidad de polvo presente en la línea de mirada. En particular un aumento de  $\beta = 1$  a  $\beta = 2$  incrementa  $\tau_{100}$  en un factor  $\sim 1.5$ . Finalmente nótese que la temperatura del polvo determina la cantidad de polvo que produce la emisión. Para una  $\beta$  fija, la opacidad a  $100\text{ }\mu\text{m}$  aumenta en un factor  $\sim 3$  al disminuir la temperatura de 30 a 25 K ya que se necesita más cantidad de polvo frío para reproducir los elevados flujos observados en el IR-lejano.

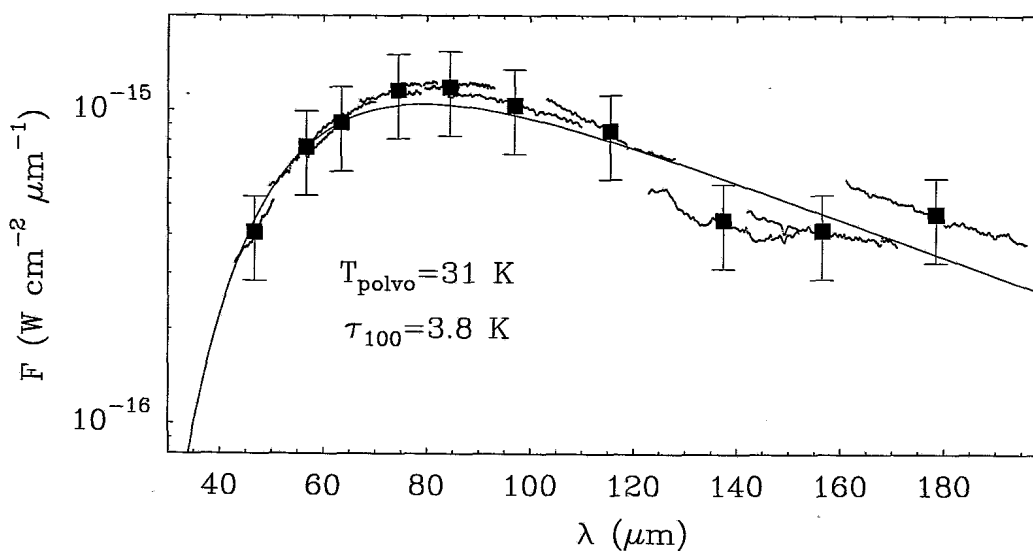


FIGURA 4.3: Mejor ajuste de la emisión del continuo de Sgr B2(M) en el IR-lejano. Se muestra el promedio del flujo del continuo para cada detector del LWS y el conjunto de datos sin líneas espectrales prominentes utilizados para el ajuste. Las barras de error corresponden a un 30% del error en la calibración del flujo. El ajuste proporciona  $T_{polvo} = 31 \pm 1\text{ K}$  y  $\tau_{100} = 3.8 \pm 0.4$ .



### 4.3 DETECCIÓN DE $\text{H}_3\text{O}^+$ : LA QUÍMICA DEL OXÍGENO

En esta sección se presenta la primera detección de  $\text{H}_3\text{O}^+$  en el espectro IR de una nube molecular. La importancia de este ion molecular para la química de las nubes interestelares radica en que su recombinación disociativa conduce a la formación de  $\text{H}_2\text{O}$  y  $\text{OH}$ . Las líneas detectadas provienen del modo de inversión  $\nu_2$  en su estado fundamental ( $0^+ \rightarrow 0^-$ ) a  $55.3 \text{ cm}^{-1}$  ( $\sim 181 \mu\text{m}$ ). Dada la resolución espectral de las observaciones, se pueden distinguir dos regiones diferentes que producen la absorción. Por un lado, el  $\text{H}_3\text{O}^+$  asociado a la envoltura de Sgr B2(M) y por otro, el asociado al gas molecular en la línea de mirada hacia el CG.

#### 4.3.1 INTRODUCCIÓN

El ión molecular saturado  $\text{H}_3\text{O}^+$  (hidrónio) juega un importante papel en la química del oxígeno (Sternberg & Dalgarno 1995), y está presente en las reacciones químicas en fase gaseosa tanto del medio interestelar denso como del difuso. Su recombinación disociativa conduce a la formación de las abundantes especies  $\text{OH}$  y el  $\text{H}_2\text{O}$  (Galloway & Herbst 1991) con *branching ratios* imprecisos para cada canal de la disociación. Sin embargo, estos *ratios* son un parámetro fundamental para la química interestelar (Sternberg *et al.* 1987). Sólo en los últimos años, los cálculos *ab initio* sobre las curvas de energía potencial del proceso  $\text{H}_3\text{O}^+ + \text{e}^-$  y los distintos canales de disociación (*p.ej.*, Ketvirtis & Simons 1999; Park 1999) han mejorado nuestro conocimiento sobre los mecanismos operantes en estas reacciones y la caracterización de los estados electrónicos de los productos neutros formados. Por otro lado, se han realizado varias medidas en el laboratorio utilizando diferentes técnicas para determinar estos *branching ratios* (Williams *et al.* 1996; Vejby-Christensen *et al.* 1997). Aunque estos experimentos miden diferentes *ratios* según la técnica utilizada, los últimos resultados indican que el agua se forma con un *ratio* de 0.25 (Jensen *et al.* 2000). Los modelos teóricos de nubes moleculares han utilizado históricamente el valor de 0.35 para la formación del agua.

El vapor de agua por su parte, es una de las especies moleculares más importantes y abundantes (después del  $\text{H}_2$  y del  $\text{CO}$ ) del ISM. Tiene un papel crítico en el enfriado radiativo del gas molecular denso (Neufeld, Lepp & Melnick 1995): desde regiones de formación estelar hasta las envolturas de estrellas evolucionadas. La determinación de su abundancia, distribución y formación es decisiva para nuestra comprensión de los procesos físicos y químicos que ocurren en una amplia variedad de entornos astronómicos. Anteriormente a ISO, se realizaron algunas observaciones de líneas maser de  $\text{H}_2\text{O}$  desde telescopios terrestres y/o embarcados en aviones (Cheung *et al.* 1969; Cernicharo *et al.* 1990, 1994, 1996c; Menten & Melnick 1991; González-Alfonso *et al.* 1995, 1999a). Dada la naturaleza maser de estas transiciones es difícil inferir correctamente la abundancia real de la molécula. Las observaciones submilimétricas y en el IR de transiciones térmicas de  $\text{H}_2\text{O}$  han confirmado la presencia ubícua de  $\text{H}_2\text{O}$  en regiones de formación estelar como Orion (Cernicharo *et al.* 1994; Wright *et al.* 2000) o Sgr B2 (Cernicharo *et al.* 1997a; Neufeld *et al.* 2000) con abundancias tan altas como  $10^{-4}$ . Además la emisión/absorción de agua aparece de forma extensa. En este sentido, el estudio de la distribución de su molécula progenitora,  $\text{H}_3\text{O}^+$ , permitirá también profundizar en la química del agua.

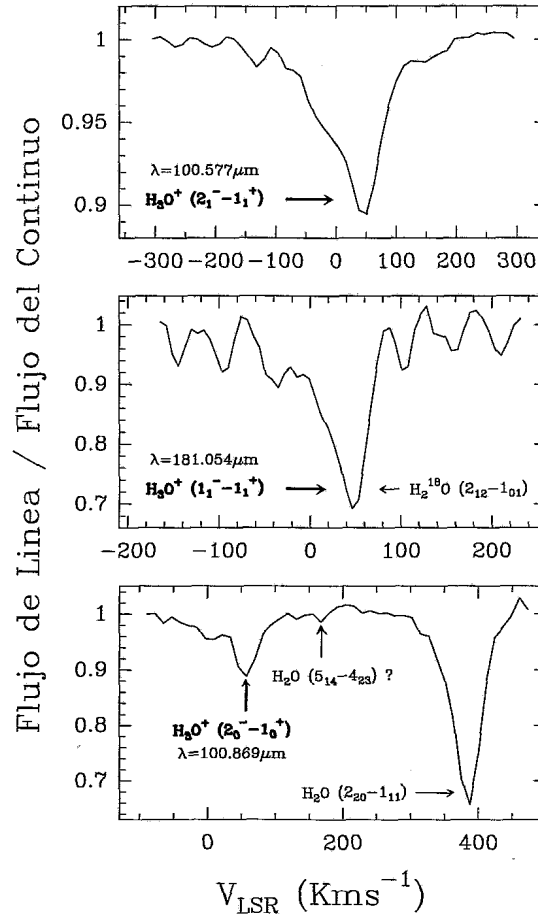


FIGURA 4.4: Observaciones LWS/Fabry-Perot de  $\text{H}_3\text{O}^+$  en Sgr B2 y longitudes de onda en reposo. La escala de intensidades está normalizada al flujo del continuo. La abscisa corresponde a la velocidad LSR para las transiciones en negrita. La figura superior contiene la absorción  $R(1,1)$ . En el medio aparecen la línea  $Q(1,1)$  mezclada con la  $2_{12}-1_{01}$  de  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ . La figura inferior muestra la línea  $R(1,0)$  y dos absorciones producidas por el agua.

#### 4.3.2 OBSERVACIONES Y REDUCCIÓN DE DATOS

Las líneas presentadas en esta sección fueron observadas en Febrero y Abril de 1997. Los TDTs de las observaciones son: 46201123 y 50800416. El número de *scans* en cada espectro fue de 18 y 3 con tiempos de integración totales de 3664 y 5040 segundos respectivamente. La resolución espectral es de  $0.015 \mu\text{m}$ . El nivel de flujo del continuo medido con el LWS/FP en cada línea de  $\text{H}_3\text{O}^+$  varía entre el 10% y el 25%. Al comparar con el nivel del continuo en el LWS/grating se comprueba que las diferencias son menores del 20% para cada línea. Este valor es similar a los errores de calibración en flujo del LWS/grating (Gry *et al.* 2002). La propagación de estas incertidumbres sistemáticas son siempre mayores que los errores estadísticos derivados del cociente señal sobre ruido (S/R) de las líneas. El nivel de continuo de las observaciones FP se ajustó para que coincidiera con el dado por el espectro grating. Posteriormente se ajustó a cada observación FP una línea de base en forma de polinomio de grado  $\leq 3$ . Los espectros fueron reducidos utilizando el paquete ISAP. Los procedimientos típicos incluyeron la eliminación de datos corruptos por impacto de rayos cósmicos, muestreo y promediado de los diferentes *scans* y sustracción de la línea de base. Los datos proceden de la versión OLP 9.5 del IDA.

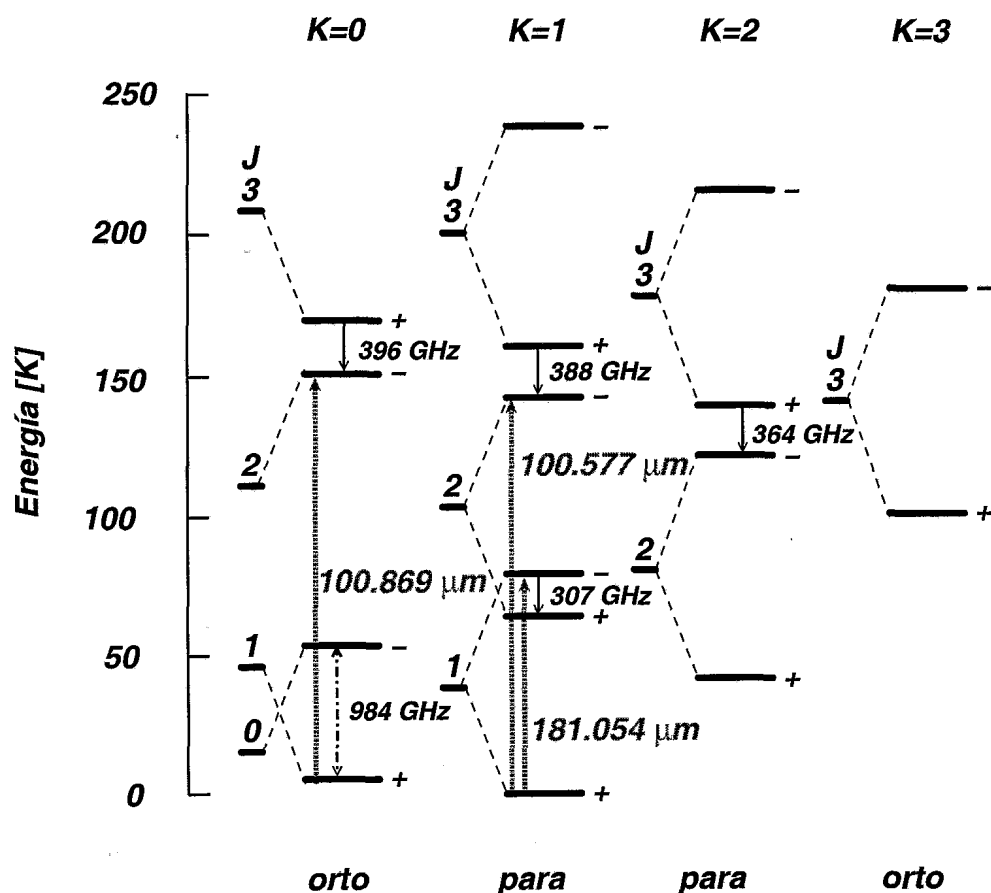


FIGURA 4.5: Diagrama de los niveles de energía del modo de inversión  $\nu_2$  de  $\text{H}_3\text{O}^+$  en su estado fundamental ( $0^+ \rightarrow 0^-$ ). Se muestran las líneas detectadas en la región submilimétrica (en GHz) y líneas IR detectadas en este trabajo (en  $\mu\text{m}$ ). La línea a 984 GHz aún no ha sido detectada.

### 4.3.3 RESULTADOS

Dada la presencia de agua y OH demostrada por las observaciones radio y milimétricas, Sgr B2 parecía un lugar idóneo para la búsqueda de  $\text{H}_3\text{O}^+$ . Además, como se verá enseguida, las propiedades espectroscópicas de este ion molecular favorecen su detección en el IR-lejano. Las tres líneas detectadas provienen de los niveles rotacionales más bajos de las escaleras  $K=0$  (orto-) y  $K=1$  (para-) del modo de inversión  $\nu_2$  en su estado fundamental ( $0^+ \rightarrow 0^-$ ) a  $\sim 100$  y  $\sim 181 \mu\text{m}$ .  $\text{H}_3\text{O}^+$  es una molécula simétrica y oblonga, isoelectrónica al  $\text{NH}_3$  y con su misma estructura física, i.e. geometría de pirámide triangular. Como el amoníaco, posee un potencial vibracional con dos mínimos que hace que el átomo de oxígeno atraviese por efecto túnel el plano formado por los tres átomos de hidrógeno. En este tipo de moléculas (también ocurre en la arsina  $\text{AsH}_3$  o la fosfina  $\text{PH}_3$ ), esto da lugar a un desdoblamiento de los niveles de rotación por la inversión de la molécula (como dar la vuelta a un guante). Dependiendo de la altura de la barrera de potencial, este desdoblamiento puede ser observado espectroscópicamente desde longitudes de onda radio hasta el infrarrojo (Pitzer 1939). Sorprendentemente, el desdoblamiento por inversión del  $\text{H}_3\text{O}^+$  es muy amplio,  $\sim 55 \text{ cm}^{-1}$  (Liu & Oka 1985) y sus transiciones del modo de inversión  $\nu_2$  (con geometría de paraguas) aparecen a frecuencias más altas que las del  $\text{NH}_3$ .

Debido a la pequeña barrera de potencial del  $\text{H}_3\text{O}^+$  ( $\simeq 10\text{kJ/mol}$ ), menos de la mitad que la del amoníaco, estas transiciones pudieron ser detectadas hace unos años en el laboratorio. Las transiciones de rotación-inversión en el submilimétrico (Plummer *et al.* 1985; Bogey *et al.* 1985) y las de inversión pura en el IR-lejano (Verhoeve *et al.* 1989). En el ISM,  $\text{H}_3\text{O}^+$  fue tentativamente detectado (Wootten *et al.* 1986; Hollis *et al.* 1986; Timmermann *et al.* 1996) y finalmente confirmado como un ion molecular abundante (Wootten *et al.* 1991; Phillips, van Dishoeck, & Keene 1992, de aquí en adelante PhvDK92). Sin embargo, las observaciones de  $\text{H}_3\text{O}^+$  desde telescopios terrestres son particularmente complicadas debido a que las líneas que se pueden observar proceden de niveles rotacionales excitados. Además, estas líneas coinciden en frecuencia con las de otras especies moleculares abundantes. La FIG. 4.5 muestra el diagrama de niveles del modo de inversión  $\nu_2$  de  $\text{H}_3\text{O}^+$  ( $0^+ \rightarrow 0^-$ ).

La FIG. 4.4 muestra las líneas detectadas (de arriba a abajo):  $2_1^- \leftarrow 1_1^+$  (rotación-inversión),  $1_1^- \leftarrow 1_1^+$  (inversión pura), y  $2_0^- \leftarrow 1_0^+$  (rotación-inversión). La notación es  $J_K^{\text{paridad}}$ . Los números cuánticos ( $J, K$ ) representan el momento angular rotacional total y la componente sobre un eje fijo en la molécula del momento angular de rotación. La línea  $1_1^- \leftarrow 1_1^+$  está recubierta con la transición rotacional  $2_{12}-1_{01}$  del agua isotópica,  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  a  $181.053 \mu\text{m}$ . Aquí se intentará determinar la contribución de cada molécula a esta absorción. Además, el espectro de la línea  $2_0^- \leftarrow 1_0^+$  muestra las líneas  $2_{20}-1_{11}$  y posiblemente  $5_{14}-4_{23}$  del vapor agua.

Al contrario de lo que sucede en el dominio submilimétrico (PhvDK92), se observa que todas las líneas absorben el continuo del IR-lejano. La velocidad de las líneas es aproximadamente  $\simeq 45 \pm 5 \text{ km s}^{-1}$ , en buen acuerdo con la velocidad de las líneas de vapor de agua también detectadas en Sgr B2 (FIG. 4.6). Si se tiene en cuenta el error en la calibración en longitudes de onda del FP ( $\pm 15 \text{ km s}^{-1}$ ), estas velocidades podrían corresponder en el límite de la resolución espectral a la velocidad sistemática de Sgr B2 ( $\sim 60 \text{ km s}^{-1}$ ). De todas formas, velocidades radiales alrededor de  $50 \text{ km s}^{-1}$  están también asociadas al gas que rodea a la mayoría de fuentes de continuo. En particular, la región central cubierta por las presentes observaciones muestra diversas componentes de gas que absorbe a esas velocidades (ver Martín-Pintado *et al.* 1999). La absorción de  $\text{H}_3\text{O}^+$  podría producirse principalmente en estas regiones. Las tres líneas presentan absorción a velocidades más negativas que aquellas asociadas al complejo de Sgr B2. Es decir,  $\text{H}_3\text{O}^+$  está presente en todo el gas molecular en la línea de mirada hacia la nube. Este comportamiento también se ha observado en las transiciones rotacionales del estado fundamental de moléculas como el agua (Cernicharo *et al.* 1997a) y el OH (Storey, Watson, & Townes 1981).

## POSIBLES CONTRIBUCIONES DE OTRAS MOLÉCULAS

Complementariamente se ha realizado un estudio de los posibles solapamientos de las líneas de  $\text{H}_3\text{O}^+$  con otras de diferentes especies moleculares y con fuerzas de línea suficientemente significativas. Este estudio es necesario para determinar la contribución exacta de cada línea y para estar seguros de la asignación que se realiza a  $\text{H}_3\text{O}^+$ . Las líneas perteneciente a transiciones de *tipo-b* de moléculas ligeramente asimétricas como  $\text{HOCO}^+$  o  $\text{HCO}$  podrían también contribuir, ya que se trata de especies presentes en Sgr B2 y con líneas próximas a las observadas.

• Para la absorción a  $\sim 100.5 \mu\text{m}$ , el radical formil ( $\text{HCO}$ ) tiene una transición rotacional ( $10_{2,8} - 9_{1,9}$ ) a  $100.579 \mu\text{m}$ . Esta transición viene de un estado energético a 217 K. De acuerdo con la densidad de columna  $N(\text{HCO}) = (1.21-1.22) \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  derivada por Hollis & Churchwell (1983) en Sgr B2, se ha calculado la absorción que produciría esta línea. La opacidad esperada no sería lo suficientemente alta para producir una absorción apreciable. Por otro lado, la línea  $5_{14}-4_{23}$  de  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  a  $100.562 \mu\text{m}$  podría contribuir. Sin embargo, la energía del nivel inferior de esta transición es de 574 K. Solo la presencia de gas notablemente caliente podría excitar esta transición de agua isotópica. Consecuentemente se ha atribuido esta absorción a la transición  $2_1^- \leftarrow 1_1^+$  de  $\text{p-H}_3\text{O}^+$  a  $100.577 \mu\text{m}$ .

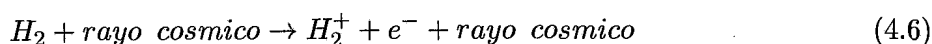
• Para la absorción a  $\sim 100.8 \mu\text{m}$ , sólo la versión protonada de  $\text{CO}_2$  podría contribuir con una línea rotacional ( $29_{2,27} - 28_{1,28}$ ) a  $100.858 \mu\text{m}$ . Las observaciones milimétricas de Minh, Irvine, & Ziurys (1988) en Sgr B2 probaron la emisión extensa de  $\text{HOCO}^+$  con una densidad de columna de  $N(\text{HOCO}^+) \simeq 2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ . Con este parámetro y el momento dipolar de *tipo-b* derivado por Green *et al.* (1976) se ha calculado qué absorción produciría esta molécula en el IR-lejano. Otra vez, la opacidad resultante es demasiado pequeña y excluye cualquier contribución de  $\text{HOCO}^+$ . Se asigna la línea a la transición  $2_1^- \leftarrow 1_1^+$  de  $\text{o-H}_3\text{O}^+$  a  $100.869 \mu\text{m}$ .

• La absorción a  $181.05 \mu\text{m}$  ha sido generalmente atribuida a la transición  $2_{12}-1_{01}$  de orto- $\text{H}_2^{18}\text{O}$  a  $181.053 \mu\text{m}$ , de la cual se puede estimar la abundancia total de agua. Sin embargo, en regiones de elevada densidad de columna de  $\text{H}_2\text{O}$  y bajas temperaturas de excitación, no se puede excluir una importante contribución de  $\text{H}_3\text{O}^+$ . La transición  $1_1^- \leftarrow 1_1^+$  de  $\text{H}_3\text{O}^+$  a  $181.054 \mu\text{m}$  incluye al nivel rotacional de más baja energía de  $\text{H}_3\text{O}^+$  y es por tanto fácilmente excitable por una fuente de IR-lejano. Este podría ser el caso del gas en la línea de mirada de Sgr B2. En la siguiente sección se analiza esta contribución.

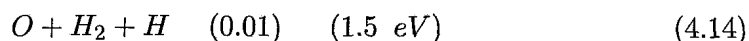
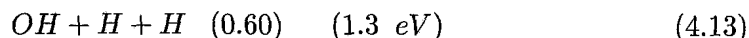
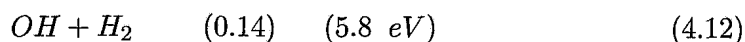
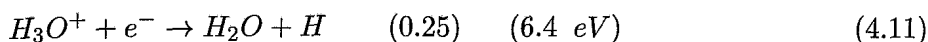
#### 4.3.4 DISCUSIÓN

Los iones poliatómicos  $\text{H}_2\text{COH}^+$ ,  $\text{HOCO}^+$ ,  $\text{HCO}^+$  o  $\text{H}_3\text{O}^+$  son las versiones protonadas de las moléculas neutras y más estables  $\text{H}_2\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$  y  $\text{H}_2\text{O}$ , además de ser los componentes fundamentales para la química basada en el oxígeno del ISM. A pesar de la dificultad que entraña, su detección astronómica es esencial para comprender los procesos químicos que tienen lugar en las nubes moleculares. Una de las formas de neutralizar los iones moleculares del ISM es recombinándose con electrones libres y disociándose en fragmentos neutros. Como se viene diciendo, la disociación del  $\text{H}_3\text{O}^+$  conduce a la formación de agua y OH.

La **FORMACIÓN** de  $\text{H}_3\text{O}^+$  en nubes moleculares densas comienza con la ionización por rayos cósmicos de  $\text{H}_2$  y finaliza por transferencia de protones con  $\text{H}_2\text{O}^+$ . Las reacciones químicas que se siguen son (*p.ej.*, Dalgarno 1976; Sternberg *et al.* 1987):



La **DESTRUCCIÓN** de  $\text{H}_3\text{O}^+$  se produce mediante su recombinación disociativa ya que no reacciona con  $\text{H}_2$ , la molécula más abundante. Los canales de disociación posibles y los últimos *branching ratios* para colisiones con electrones de baja energía son (Jensen *et al.* 2000):



Las exotermicidades corresponden únicamente a la formación de productos en el estado electrónico fundamental. Como se observa, a esas energías de impacto, el 25 % del proceso formará agua mientras que el 74% formará OH. Pese a todo, estos resultados experimentales no son sensibles a los estados electrónicos de los productos formados. Por ejemplo, es imposible explicar por qué el canal más exotérmico,  $\text{H}_2\text{O}(\text{X}^1\text{A}_1) + \text{H}$ , que produce agua en su estado fundamental, no es la reacción con el *ratio* más elevado. Los cálculos *ab initio* de los estados de Rydberg de  $\text{H}_3\text{O}$ , sugieren que el exceso de energía interna acumulado en el  $\text{H}_2\text{O}$  formado permitiría un decaimiento posterior para producir  $\text{OH}(\text{X}^2\Pi) + 2\text{H}$  (Ketvirtis & Simons 1999). Además, estados inaccesibles como  $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma)$  podrían ser producidos si la energía de los electrones aumentara.

La conclusión más importante en los últimos años de investigación sobre el proceso de recombinación disociativa de  $\text{H}_3\text{O}^+$  es que si el hidronio es un ion abundante, tanto el agua como el OH serán especies moleculares dominantes en el espacio. Puesto que las líneas rotacionales de estas especies aparecen en el IR-lejano, su contribución al espectro ISO/LWS de Sgr B2 será determinante.

### DENSIDAD DE COLUMNA Y ABUNDANCIA DE $\text{H}_3\text{O}^+$

Las líneas detectadas de  $\text{H}_3\text{O}^+$  aparecen absorbiendo la emisión de continuo del polvo. Esto significa que surgen en regiones de la nube donde las temperaturas de excitación son menores que las del polvo ( $T_{exc} \leq T_{polvo}$ ). Por tanto, las observaciones en el IR-lejano son sensibles a las regiones situadas delante de las fuentes de continuo. Es decir, las líneas de  $\text{H}_3\text{O}^+$  provienen de la extensa envoltura del complejo, donde la menor densidad del gas en comparación con los núcleos de formación estelar hace que se pueda despreciar, en primera aproximación, la excitación colisional de  $\text{H}_3\text{O}^+$ . La fuerte emisión del polvo y la elevada opacidad del continuo a las longitudes de onda de la inversión hacen que la excitación de la molécula esté dominada por los fotones del IR-lejano. Aquí se considera únicamente excitación radiativa por fotones procedentes del polvo y por tanto, temperaturas de excitación ligeramente inferiores a la del polvo ( $T_{exc} = 20 - 27 \text{ K}$ ). Las escaleras orto- y para- de la molécula han sido consideradas separadamente para el cálculo de las funciones de partición de cada especie.

Los coeficientes de Einstein de las transiciones observadas han sido derivados utilizando el momento dipolar eléctrico de  $\sim 1.44 \text{ D}$  calculado teóricamente por Botschwina, *et al.* (1983). Considerando que las líneas son ópticamente delgadas, la absorción asociada a  $2_1^- \leftarrow 1_1^+$  lleva a una densidad de columna  $N(\text{p-H}_3\text{O}^+) \simeq (9 \pm 2) \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ , un factor  $(1.25 \pm 0.5)$  mayor que la densidad de columna de orto- $\text{H}_3\text{O}^+$  obtenida con la línea  $2_0^- \leftarrow 1_0^+$ . Este resultado sugiere que el cociente orto/para (OTP) difiere de su valor en ETL. Parece que a las temperaturas y densidades del gas en la envoltura, la especie para- $\text{H}_3\text{O}^+$  es más abundante que la especie orto.

El cociente OTP es un parámetro crítico en el tratamiento del  $\text{H}_3\text{O}^+$  interestelar. También para Sgr B2, aunque con líneas de  $\text{H}_3\text{O}^+$  en emisión, Wootten *et al.* (1991) asumieron el valor clásico de 3, mientras que PhvDK92 utilizaron un OTP igual a 1, que parece válido en el límite de alta temperatura ( $T \geq 50$  K) cuando las reacciones de intercambio de núcleos de hidrógeno con otras moléculas son lo suficientemente rápidas como para cambiar la relación de espines nucleares. Si se asume que el cociente OTP es simplemente  $2_0^- \leftarrow 1_0^+ / 2_1^- \leftarrow 1_1^+$ , se deriva una abundancia respecto a  $\text{H}_2$  de  $\sim 1 \times 10^{-9}$  para el gas asociado a Sgr B2, con un factor 2 de error debido al rango de  $T_{\text{exc}}$  utilizado y a la propagación de los errores de calibración de las observaciones. La mayor fuente de error en este resultado es la densidad de columna de  $\text{H}_2$  elegida para la región donde se produce la absorción ( $\sim 2 \times 10^{23} \text{ cm}^{-2}$ ), pudiendo aumentar en un orden de magnitud si la absorción se produce sólo en las capas más externas de la la envoltura de Sgr B2 ( $A_V \simeq 10$  mag). Estos resultados se pueden comparar con los modelos químicos teóricos de nubes moleculares que predicen  $\chi(\text{H}_3\text{O}^+) \simeq (1-4) \times 10^{-9}$  (*p.ej.*, Millar *et al.* 1991).

Evidentemente, las líneas detectadas en el IR-lejano deben influir en la población de los niveles observados en el submilimétrico. PhvDK92 sugirieron que la intensidad de la línea  $3_2^+ \rightarrow 2_2^-$  de  $\text{p-H}_3\text{O}^+$  a 364 GHz estaría especialmente influenciada por el bombeo IR. Nuestras observaciones indican que el bombeo IR afectará a las intensidades de todas las líneas submilimétricas. En particular, la línea a 307 GHz con nivel superior  $1_1^-$  estará esencialmente poblada por la absorción de fotones IR procedentes del nivel rotacional fundamental  $1_1^+$ . Sin embargo, las líneas submilimétricas e IR probablemente tracen componentes de gas diferentes.

Por otro lado, los perfiles de las líneas  $2_1^- \leftarrow 1_1^+$  y  $2_0^- \leftarrow 1_0^+$  (FIG. 4.4) también muestran una absorción del  $\sim 5\%$  para velocidades más negativas que las de Sgr B2. La abundancia de  $\text{H}_3\text{O}^+$  derivada para la componente de gas entre  $-50$  y  $+20 \text{ km s}^{-1}$  es similar a la de la envoltura de Sgr B2 si efectivamente las nubes difusas situadas en la línea de mirada hacia el CG tienen una densidad de columna total de hidrógeno molecular de  $\sim 3 \times 10^{22} \text{ cm}^{-2}$  (Neufeld *et al.* 2000).

### CONTRIBUCIÓN DE $\text{H}_3\text{O}^+$ A LA LÍNEA DE $\text{H}_2^{18}\text{O}$

Con estos valores se puede ahora determinar la contribución de la línea  $1_1^- \leftarrow 1_1^+$  de  $\text{H}_3\text{O}^+$  a la absorción generalmente asociada con la transición  $2_{12}-1_{01}$  de  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ . Si se considera el mismo rango de temperaturas de excitación y se fija la densidad de columna asociada al  $\text{p-H}_3\text{O}^+$ , se concluye que  $\leq 40\%$  de la absorción a  $181.05 \mu\text{m}$  observada en Sgr B2 corresponde al ion hidronio. Para todo el gas situado en la línea de mirada, la contribución es  $\geq 40\%$ . Esta diferencia se debe fundamentalmente a la mayor abundancia de  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  en el CG y a diferencias en la excitación radiativa entre las dos componentes. Para una densidad de columna de  $\text{H}_3\text{O}^+$  dada, la contribución a la absorción a  $181.05 \mu\text{m}$  decrece con el aumento de  $T_{\text{exc}}$ . En la envoltura de Sgr B2,  $T_{\text{exc}}$  es mayor que en el medio difuso porque la emisión del continuo IR-lejano en Sgr B2 tiende a elevar  $T_{\text{exc}}$  a valores próximos a  $T_{\text{polvo}}$ .

La similar abundancia de  $\text{H}_3\text{O}^+$  derivada para la envoltura de Sgr B2 y para todo el gas situado en las nubes de la línea de mirada, sugiere que tanto OH como  $\text{H}_2\text{O}$  van a jugar un importante papel para la *química del oxígeno* en esta particular línea de mirada de la galaxia. Las principales transiciones rotacionales de  $\text{H}_2\text{O}$  y OH aparecen en el IR-lejano y prácticamente no han sido estudiadas. La elevada resolución espectral de los futuros instrumentos heterodinos embarcados en *Herschel* permitirá la observación independiente de  $\text{H}_3\text{O}^+$  y  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  a  $\sim 181 \mu\text{m}$ , proporcionando la determinación definitiva de la abundancia de ambas especies en la línea de mirada hacia Sgr B2 y en otras nubes moleculares.

## 4.4 EL VAPOR DE AGUA: ¿LA ENVOLTURA CALIENTE?

En esta sección se presenta las primeras observaciones de la absorción térmica del vapor de agua en Sgr B2 con suficiente resolución espectral ( $\sim 35 \text{ km s}^{-1}$ ) y el primer cartografiado desde tierra de la línea maser  $3_{13-220}$  a 183.3 GHz. Debido a la gran opacidad de las líneas de  $\text{H}_2\text{O}$  en el IR-lejano y a los diferentes mecanismos que contribuyen a la población de los niveles rotacionales (colisiones y radiación) el análisis de la transferencia de radiación es complicado. Mediante algunos modelos no-locales se ha determinado la densidad de columna de  $\text{H}_2\text{O}$  en la envoltura de Sgr B2. Desafortunadamente los modelos son poco sensibles a la temperatura cinética y a la densidad de la región absorbente.

### 4.4.1 INTRODUCCIÓN

Los modelos de equilibrio químico predicen que bajo las condiciones típicas de una nube molecular, el agua puede ser la especie más abundante después de  $\text{H}_2$  y  $\text{CO}$ . Esto se debe a la estabilidad de la molécula y a la relativa sencillez de la cadena de reacciones químicas que la forman en fase gaseosa (véase la SEC. 4.3.4). Por tanto, la determinación de la extensión de la emisión/absorción del vapor de agua, su distribución y abundancia es fundamental para poder contrastar con los modelos teóricos. Para el caso de las nubes moleculares más calientes, se predice que el agua sea una especie dominante en el enfriado radiativo de las regiones de formación estelar dada su elevada abundancia en esos particulares entornos, pudiendo incluso determinar si se forman estrellas en el colapso gravitatorio de la nube (Neufeld *et al.* 1995). En estas condiciones, una gran parte del oxígeno atómico en fase gaseosa podría formar  $\text{H}_2\text{O}$  adicionalmente a la recombinación disociativa de  $\text{H}_3\text{O}^+$  mediante las reacciones químicas  $\text{O} + \text{H}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{H}$  y  $\text{OH} + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$ , que son rápidas y efectivas para el gas a  $T_k \geq 300 \text{ K}$  (Neufeld & Melnick 1987). Complementariamente, los mantos de hielo sobre la superficie de los granos de polvo son también una importante reserva de  $\text{H}_2\text{O}$  en fase sólida que puede contribuir al aumento de la abundancia del agua en fase gaseosa si existen mecanismos que retornen  $\text{H}_2\text{O}$  a la fase gaseosa.

Desafortunadamente el  $\text{H}_2\text{O}$  es una especie abundante en la atmósfera terrestre y hace que las observaciones astronómicas de sus transiciones rotacionales, vibracionales y electrónicas sean particularmente difíciles de observar. Desde telescopios terrestres o embarcados en aviones se han podido realizar observaciones de algunas líneas maser del agua cuyo análisis, interpretación y estimación de la abundancia es complicado: a 22 GHz (Cheung *et al.* 1969); a 183 GHz (Cernicharo *et al.* 1990) y a 325 GHz (Menten *et al.* 1990). Las primeras observaciones con KAO de la variante isotópica  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  indicaban bajas abundancias en Sgr B2  $\chi(\text{H}_2^{18}\text{O}) \simeq 10^{-7}$  (Zmuidzinas *et al.* 1995), pero estas estimaciones se basaban sólo en la detección de línea  $1_{10-101}$  de  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  a 548 GHz. La determinación de  $\chi(\text{H}_2\text{O})$  utilizando la transición  $3_{13-220}$  de  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  a 203 GHz es aún más complicada porque la línea está contaminada por otras especies moleculares (Jacq *et al.* 1988). En la SEC. 4.3.4 se ha visto también que la línea  $2_{12-101}$  de  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  a  $181 \mu\text{m}$  está contaminada por una transición de inversión de  $\text{H}_3\text{O}^+$ . Debido a estos problemas con la observación directa de  $\text{H}_2\text{O}$ , se ha intentado estimar la abundancia de agua observado especies moleculares muy relacionadas. En particular se han utilizado las observaciones de HDO (*p.ej.*, Jacq *et al.* 1990; Helmich *et al.* 1996) y  $\text{H}_3\text{O}^+$  (Phillips *et al.* 1992; SEC. 4.3). En ninguno de los dos caso la determinación de la abundancia del vapor de agua,  $\chi(\text{H}_2\text{O})$ , es directa.



En primer lugar porque el cociente de abundancias  $\text{HDO}/\text{H}_2\text{O}$  puede ser diferente en distintas nubes moleculares y en segundo lugar, porque la obtención de  $\chi(\text{H}_2\text{O})$  a partir de  $\chi(\text{H}_3\text{O}^+)$  requiere un modelo químico donde el *branching ratio* de la recombinación disociativa de  $\text{H}_3\text{O}^+$  que produce agua (reacción 4.11) este perfectamente determinado y no existan otros mecanismos de formación de  $\text{H}_2\text{O}$  como la fotoevaporación de los mantos de hielo o los mecanismos típicos en el gas caliente de regiones sometidas a choques.

El telescopio espacial ISO ha proporcionado la oportunidad de realizar observaciones de numerosas líneas térmicas del vapor de agua en el IR-medio y -lejano en numerosas regiones y estrellas del ISM y CSM. La principal conclusión de estos estudios es que la abundancia del vapor de agua en regiones calientes es elevada, pudiendo sobrepasar  $\chi(\text{H}_2\text{O}) \simeq 10^{-4}$  en zonas de formación estelar como Orion (Cernicharo *et al.* 1999; Wright *et al.* 2000). Posteriormente, el lanzamiento del telescopio SWAS (Melnick *et al.* 2000) ha permitido realizar observaciones de la transición rotacional fundamental  $1_{10}-1_{01}$  de  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  y  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  a 557 y 548 GHz respectivamente. El *haz* de SWAS ( $\sim 4'$ ) es significativamente mayor que el *haz* del ISO/LWS ( $\sim 80''$ ) y sus resultados son más sensibles al vapor de agua frío y menos denso. Las primeras estimaciones,  $\chi(\text{H}_2\text{O}) \simeq 10^{-8}$ , sugieren que la abundancia de agua en la mayoría de regiones observadas por SWAS es menor de la estimada por los modelos químicos. Además, la abundancia derivada para la otra especie molecular dominante en la química del oxígeno en el ISM,  $\text{O}_2$ , es sorprendentemente baja,  $\chi(\text{O}_2) < 3 \times 10^{-7}$  (Goldsmith *et al.* 2000). Como consecuencia de estos resultados se ha sugerido que la menor abundancia de  $\text{H}_2\text{O}$  y  $\text{O}_2$  en estas regiones puede ser explicada por una intensa fotodisociación en nubes inhomogéneas de baja densidad (Spaans & van Dishoeck 2001) o una depleción del oxígeno en mantos de hielo en nubes densas y frías (Bergin *et al.* 2000). Además, en el CAP. 5 se muestra que las observaciones con ISO de las líneas de  $[\text{OI}]63$  y  $145 \mu\text{m}$  sugieren que la mayoría de oxígeno en Sgr B2 puede estar en forma atómica, lo cual representa un desafío más para la comprensión de la química basada en el oxígeno. Recientemente se ha estimado que un  $\sim 70\%$  del oxígeno en fase gaseosa presente en las nubes difusas de la línea de mirada hacia Sgr B2 se encuentra en forma atómica y no asociado con CO o  $\text{H}_2\text{O}$  (Vastel *et al.* 2002).

Las observaciones más recientes de la absorción térmica del agua en Sgr B2 ponen de manifiesto la presencia ubíqua de esta especie en toda la región. Las primeras observaciones en el IR-lejano que mostraban su distribución extensa tienen el inconveniente de la baja resolución espectral ( $\sim 1000 \text{ km s}^{-1}$ ) del modo grating con ISO/LWS (Cernicharo *et al.* 1997a y CAP. 5) que permite sólo la clara detección de la línea fundamental  $2_{12}-1_{01}$  a  $\sim 179 \mu\text{m}$ . Posteriormente se han presentado las observaciones con SWAS de la otra línea procedente del nivel rotacional fundamental de orto- $\text{H}_2^{16}\text{O}$  y su isotópomo  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  (Neufeld *et al.* 2000; 2003), así como la absorción de la línea  $1_{11}-0_{00}$  de HDO a 894 GHz (Comito *et al.* 2003). El mayor problema en la interpretación de estos datos se refiere a las condiciones físicas de la región responsable de la absorción del agua y al escaso número de líneas observadas que se consideran en los modelos. Según estos autores la absorción observada en el dominio submilimétrico puede proceder de la envoltura ambiente y densa de Sgr B2(M) o de la envoltura más caliente y difusa de la región. Obviamente, con una única línea de  $\text{H}_2\text{O}$  detectada no se puede determinar la procedencia dominante del vapor de agua ni sus condiciones físicas.

En esta sección se presentan y analizan las observaciones LWS/FP de 14 líneas térmicas de  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  y  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  en Sgr B2(M) así como el primer cartografiado de la línea maser  $3_{13}-2_{20}$  a 183.3 GHz de la región que ayuda a determinar la geometría de la región responsable de la emisión/absorción del vapor de agua.

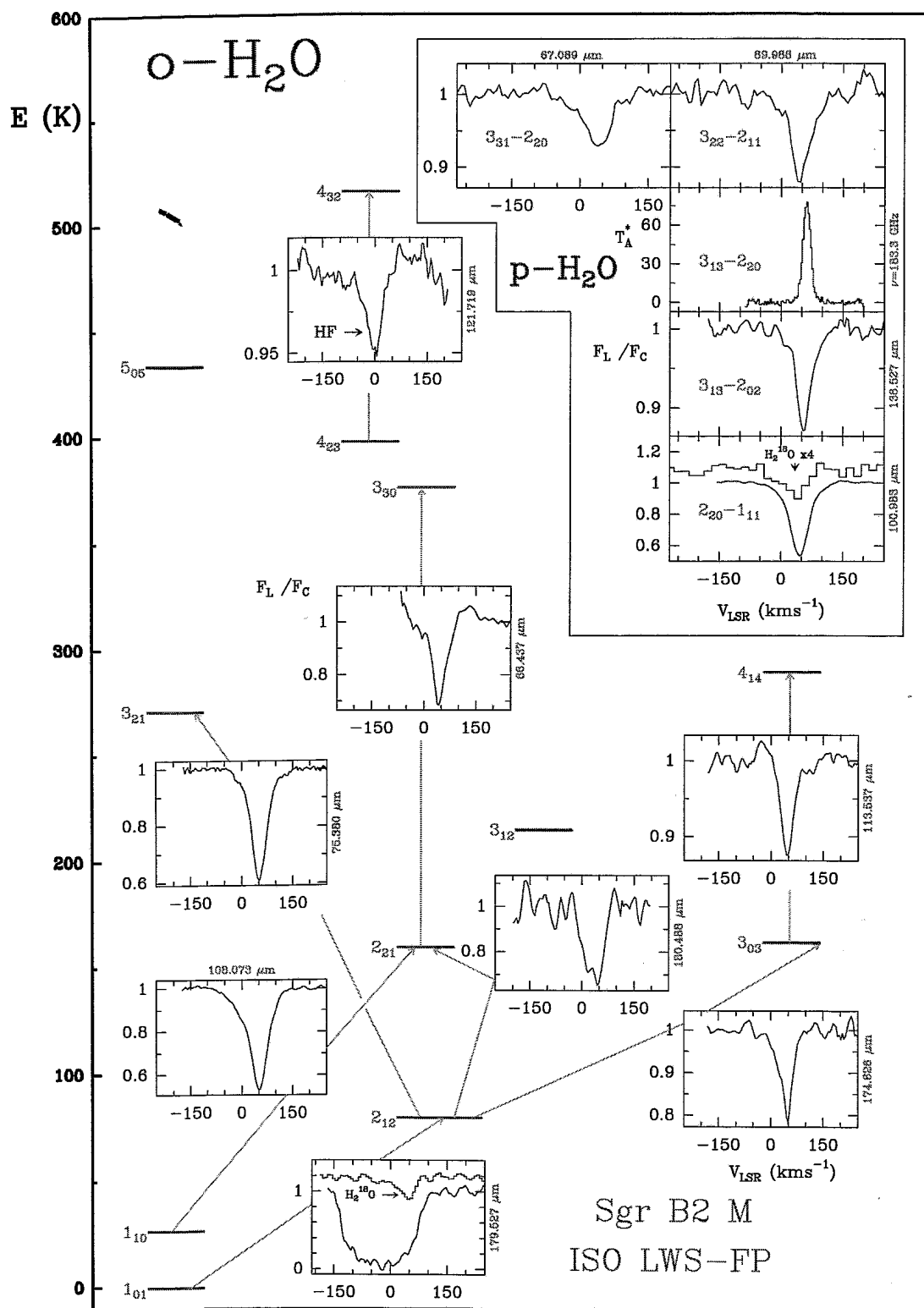


FIGURA 4.6: Observaciones LWS/FP de  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  y  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  hacia Sgr B2(M) y diagrama de niveles rotacionales de orto- $\text{H}_2^{16}\text{O}$ . La escala de las ordenadas corresponde a  $F_L/F_C$  y la abscisa a la longitud de onda en micras. Todas las líneas en el IR-lejano aparecen en absorción. La línea en emisión corresponde a la transición maser  $3_{13} \rightarrow 2_{20}$  de para- $\text{H}_2^{16}\text{O}$  a 183 GHz observada desde el radiotelescopio IRAM-30m en Pico Veleta (véase la FIG. 4.7).

#### 4.4.2 OBSERVACIONES Y REDUCCIÓN DE DATOS

La mayoría de las líneas rotacionales puras del vapor del agua que juegan un papel importante para el calentamiento y enfriamiento radiativo del ISM aparecen en el dominio submilimétrico e IR-lejano. Por tanto, son necesarias las observaciones desde telescopios embarcados en aviones, globos o satélites que consigan reducir o eliminar la absorción atmosférica terrestre. Muchas de estas líneas aparecen en el rango espectral observable con el ISO/LWS.

#### OBSERVACIONES EN EL IR-LEJANO CON ISO

En este trabajo se ha utilizado el LWS/FP para buscar varias líneas de  $\text{H}_2\text{O}$  y sus isótopos en la dirección de Sgr B2(M). La resolución espectral en velocidad es  $\sim 35 \text{ km s}^{-1}$  y la apertura circular del instrumento tiene un tamaño angular  $\sim 80''$ . La mayoría de las líneas detectadas proceden de observaciones realizadas en nuestras propuestas de tiempo de observación con ISO. Sin embargo, se ha realizado una extensa búsqueda de más líneas de  $\text{H}_2\text{O}$  en el IDA para poder examinar y promediar el mayor número posible de líneas. Los números que identifican las líneas presentadas son: 6201118, 46201123, 46900332, 47600907, 47600908, 47601001, 49800301, 50400431, 50401028, 50600506, 50600603, 50600814, 50601013, 50601112, 50700208, 50700507, 50700610, 50700707, 50800416, 83600704, 83800606, 84500102, 84700301 y 84900803. Todos los productos LWS han sido procesados y comparados en dos versiones del archivo diferentes, la OLP 6.0 y la OLP 10.1. La única diferencia entre las dos versiones (separadas temporalmente por 3 años) es que las versiones más recientes producen un  $<10 \%$  menos absorción en algunas líneas debido a diferencias en los niveles de continuo entre una y otra OLP. Los espectros fueron analizados interactivamente con ISAP. El nivel medio del continuo LWS/FP en cada línea varía  $<20 \%$ , valor que puede tomarse como valor de referencia en el error en la calibración del flujo (véase Gry *et al.* 2002). Después de comprobar los niveles de continuo de las observaciones en el modo AOT LWS L01, se ajustó una línea de base polinómica que se adoptó como nivel de continuo para cada línea individual. Aunque se han utilizado algunas observaciones AOT LWS L03, casi todas las líneas de  $\text{H}_2\text{O}$  presentadas proceden de nuestras propias observaciones en el modo AOT LWS L04 que proporcionan un muestreo superior de cada línea, un error en la calibración de la longitud de onda inferior, y mejores cocientes señal sobre ruido (S/R). El número de *scans* fue  $\geq 12$  dependiendo de la absorción esperada en cada línea rotacional. Las líneas de  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  y  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  detectadas y el diagrama de niveles de orto- $\text{H}_2\text{O}$  rotacionales se muestran en la FIG. 4.6.

#### OBSERVACIONES mm CON IRAM-30m

La línea de para- $\text{H}_2\text{O}$  a 183.31 GHz puede observarse desde telescopios terrestres si las condiciones meteorológicas son excepcionales (Cernicharo *et al.* 1990). Las primeras observaciones de esta línea en la dirección de Sgr B2 fueron obtenidas con el radiotelescopio IRAM-30m en Diciembre de 1999. A pesar de que la fuente transita a  $24^\circ$  dada la posición del Pico Veleta, la opacidad atmosférica promedio alrededor de 183.3 GHz fue de  $\sim 1.7$ , es decir, una columna de vapor de agua atmosférico de  $\sim 0.9 \text{ mm}$  en la línea de mirada. Los receptores SIS empleados cubren la banda 120-184 GHz. En las frecuencias más altas la temperatura del receptor era de unos 160 K. En la configuración elegida para las observaciones, las temperaturas de sistema fueron típicamente de 3000 K. El apuntado fue comprobado utilizando la intensa emisión procedente de W49N (Cernicharo *et al.* 1990; González-Alfonso *et al.* 1995).

Después de verificar que la emisión procedente de Sgr B2 era relativamente compacta se realizaron las observaciones en el modo *wobbler-switching* que proporciona líneas de base notablemente planas. Debido a la baja declinación de Sgr B2 y a la opacidad atmosférica terrestre a esas frecuencias, el mapa obtenido sólo incluye las regiones adyacentes a las condensaciones Sgr B2(M) y (S). Desafortunadamente no se pudo alcanzar el pico de emisión de Sgr B2(N). Las mismas observaciones se intentaron repetir en Enero de 2001 y 2002. En la campaña de 2001 las condiciones climáticas imposibilitaron las observaciones mientras que en la de 2002 se pudo obtener una ventana de 30 minutos de observaciones con buena transmisión atmosférica. En estas observaciones se pudo comprobar el pico de intensidad en Sgr B2(M) y confirmar que la extensión de la emisión era superior al *haz* del telescopio a 183 GHz. La FIG. 4.7 muestra el mapa de la intensidad total integrada de la línea, mientras que la FIG. 4.8 muestra la intensidad de línea integrada sobre diferentes rangos de velocidad.

#### 4.4.3 RESULTADOS

La molécula del agua es un rotor asimétrico cuyos niveles rotacionales se especifican generalmente mediante  $J_{K_{pr}, K_{ob}}$  donde J es el número cuántico rotacional y la pareja de números  $K_{pr}$  y  $K_{ob}$  corresponden a los valores de  $|K|$  de los niveles de un rotor simétrico *prolongo* y *oblongo* que se correlacionan con los niveles de un rotor asimétrico (para una molécula asimétrica no son números cuánticos reales). Debido al momento dipolar eléctrico del agua (1.88 D) y a que sus transiciones rotacionales ocurren en el IR-lejano, sus coeficientes de Einstein son elevados. Esto provoca que la termalización de sus niveles sólo ocurra a densidades muy altas. Las condiciones físicas de Sgr B2 y las especiales propiedades espectroscópicas y de abundancia del H<sub>2</sub>O hacen que sus líneas rotacionales en el IR-lejano tengan una opacidad muy elevada y se puede anticipar que la interpretación de los modelos no va a ser sencilla.

Las líneas de agua detectadas en el IR-lejano se muestran en la FIG. 4.6. Exceptuando la línea a 179.527  $\mu\text{m}$  procedente del estado fundamental y quizás la línea a 108.073  $\mu\text{m}$  procedente del primer nivel rotacional excitado, todas las demás líneas están centradas a  $\sim 50 \text{ km s}^{-1}$ . La línea fundamental  $2_{12}-1_{01}$  de o-H<sub>2</sub>O está saturada y absorbe en el intervalo de velocidades desde -150 a +100  $\text{km s}^{-1}$ . En el CAP. 5 se muestra que la absorción producida por esta línea es extensa en una región de  $\sim 70 \text{ pc}$  alrededor de Sgr B2(M) demostrando la presencia ubicua del agua en este complejo molecular.

La velocidad promedio de todas las líneas de H<sub>2</sub>O observadas es  $50 \pm 5 \text{ km s}^{-1}$ , en buen acuerdo con la de otras especies oxigenadas (H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> u OH) también detectadas con ISO. Teniendo en cuenta la calibración absoluta en longitudes de onda del LWS/FP ( $\pm 15 \text{ km s}^{-1}$ ), estas velocidades pueden ser consistentes con la velocidad esperada ( $\sim 60 \text{ km s}^{-1}$ ) para la mayoría del gas en Sgr B2 (véase Hüttemeister *et al.* 1995 para el caso del amoníaco). En cualquier caso, también existen componentes de gas a  $\sim 50 \text{ km s}^{-1}$  situadas delante de las fuentes de continuo en Sgr B2(M) (Martín-Pintado *et al.* 1990). Existe la posibilidad de que estas especies procedan específicamente de estas regiones. Sólo con mayor resolución espectral se podrá determinar el centro real de la velocidad sistemática de las líneas de H<sub>2</sub>O.

Para determinar la contribución exacta del vapor de agua en algunas líneas detectadas hay que analizar los posibles recubrimientos con otras especies moleculares con transiciones próximas en longitud de onda. En particular, la línea  $4_{32}-4_{23}$  de orto-H<sub>2</sub>O está muy contaminada por la línea  $J=2-1$  de HF a 121.697  $\mu\text{m}$  (Neufeld *et al.* 1997), mientras que la línea  $2_{12}-1_{01}$  de orto-H<sub>2</sub>O tiene una pequeña contribución de la línea  $1_1^- \leftarrow 1_1^+$  de H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> (SEC. 4.3.4).

El resultado principal de estas novedosas observaciones del vapor del agua en el IR-lejano es que todas las líneas rotacionales aparecen en absorción. Por lo tanto, las líneas de  $\text{H}_2\text{O}$  en Sgr B2(M), donde la emisión del continuo es ópticamente espesa (SEC. 4.2), surgen en regiones donde las temperaturas de excitación ( $T_{\text{ex}}$ ) son menores que la temperatura del polvo ( $T_{\text{polvo}} \simeq 20\text{--}30\text{ K}$ ). Sin embargo, el problema de la excitación de los niveles rotacionales de  $\text{H}_2\text{O}$  no es sencillo ya que además de las posibles auto-absorciones, las colisiones con otras especies y el bombeo radiativo contribuyen a la población de los niveles rotacionales. El papel del polvo es fundamental en moléculas ligeras como  $\text{H}_2\text{O}$  u  $\text{OH}$ , donde la mayoría de sus transiciones de baja energía aparecen en el IR-lejano y  $T_{\text{ex}}$  está afectada por la emisión del continuo.

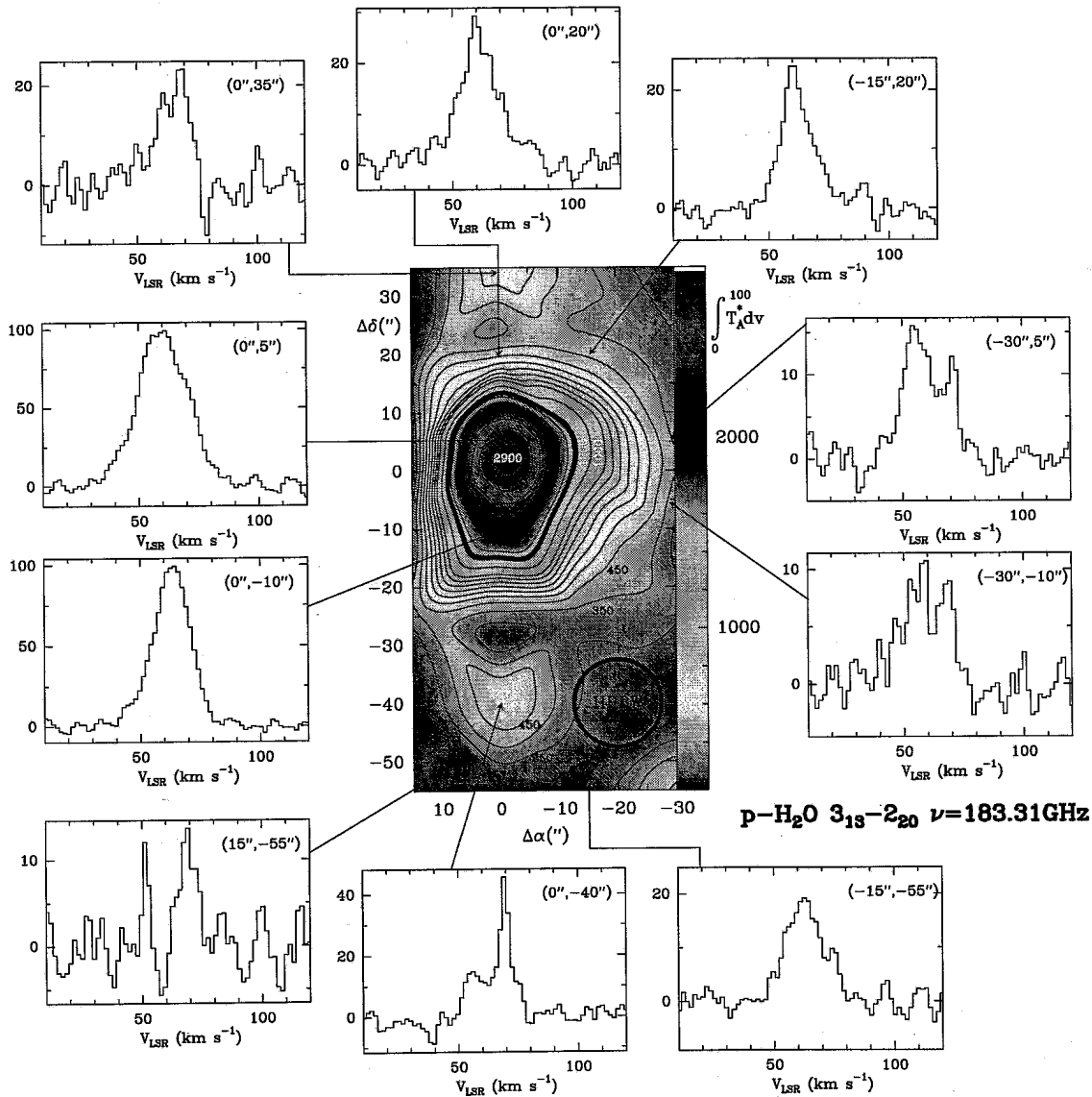


FIGURA 4.7: Mapa de la línea  $3_{13}-2_{20}$  de  $\text{para-H}_2\text{O}$  a  $183\text{ GHz}$  alrededor de Sgr B2(M) observada desde el radiotelescopio IRAM-30m en Pico Veleta (Granada). Los contornos de niveles del mapa en  $\text{K km s}^{-1}$  vienen indicados en la figura. Se muestran también algunos perfiles de la línea en posiciones significativas. Las escala de las ordenadas está en  $T_A^*$ .

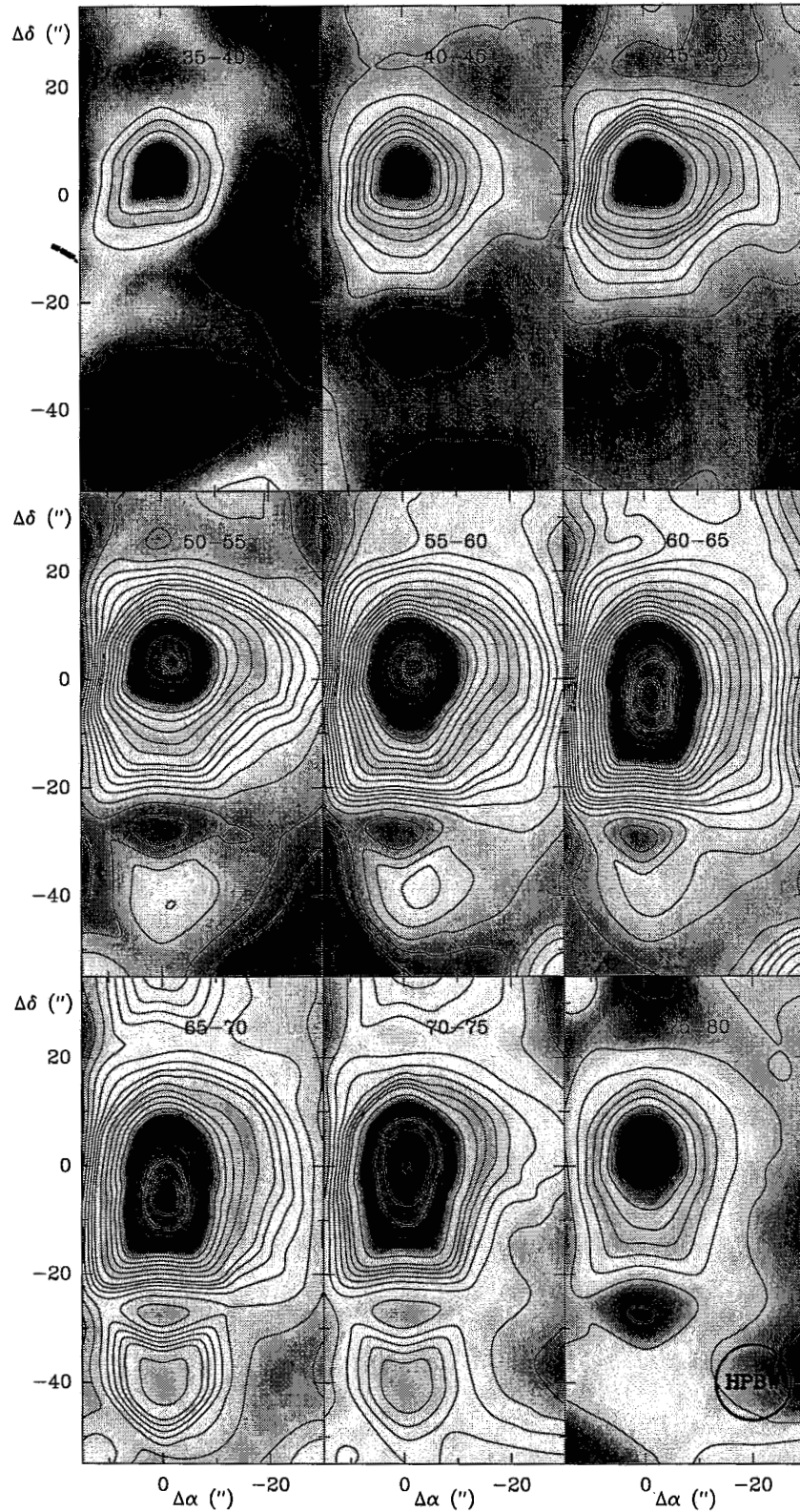


FIGURA 4.8: Mapas en velocidades de la línea  $3_{13}-2_{20}$  de para- $\text{H}_2\text{O}$  a 183 GHz alrededor de Sgr B2(M) observada desde el radiotelescopio IRAM-30m en Pico Veleta (Granada). Los contornos de niveles oscilan entre 0 y  $120 \text{ K km s}^{-1}$  en saltos de  $15 \text{ K km s}^{-1}$  y entre 160 y 600 en saltos de  $30 \text{ K km s}^{-1}$ . El rango en velocidades viene indicado en cada panel.

#### 4.4.4 MODELOS DE H<sub>2</sub>O EN SGR B2(M)

En una región tan opaca como la de Sgr B2(M), las regiones más externas pueden absorber la emisión del polvo y la propia emisión del vapor de agua procedente de las regiones más internas de la nube. En esta sección se presentan algunos modelos no-locales sencillos que ayudan a definir bajo qué condiciones las líneas de agua en el IR-lejano aparecen en absorción.

Como indica la emisión de para-H<sub>2</sub>O a 183 GHz alrededor de Sgr B2(M) (FIG. 4.7), la absorción del vapor de agua se puede modelar mediante una *envoltura* de gas que rodea a una *núcleo* opaco en el IR-lejano y más compacto. Las observaciones de KAO a 50 y 100  $\mu$ m (Goldsmith *et al.* 1992), los modelos de OH (SEC. 4.5) y la distribución de la emisión maser a 183 GHz sugieren que la condensación central puede representarse mediante un *núcleo* esférico de  $\sim 25''$  de diámetro (radio  $\simeq 0.5$  pc). Las dimensiones de la región absorbente que rodea al *núcleo* central y su densidad de columna de material molecular son más difíciles de determinar *a priori*, ya que el gas situado en la envoltura difusa y caliente aparece a la misma velocidad sistemática del resto del gas ambiente (Hüttemeister *et al.* 1995). Las observaciones de OH en el IR-lejano son más sensibles a la geometría de la región y ayudan a estimar las dimensiones máximas de la envoltura caliente y difusa de Sgr B2(M) en  $\sim 42''$  (SEC. 4.5). La absorción producida por H<sub>2</sub>O ocurre necesariamente en el interior de esta región. Siguiendo los modelos de la absorción del amoníaco en el IR-lejano (Ceccarelli *et al.* 2002), se ha asumido un tamaño de  $\sim 30''$  para la envoltura de vapor de agua responsable de la absorción observada por ISO.

Para el *núcleo* se ha escogido  $\tau_{80}=2.5$  que proporciona  $N(\text{H}_2)\simeq 4\times 10^{23} \text{ cm}^{-2}$  y una ley de opacidad con  $\beta=1$  dada por  $\tau=\tau_{80}\times[80/\lambda]$  y  $T_{\text{polvo}}=30$  K (véase la SEC. 4.2). Para la resolución del problema se ha adaptado el código numérico (véase 2.4.2) desarrollado por González-Alfonso & Cernicharo (1993) a las transiciones rotacionales del nivel vibracional fundamental de orto-H<sub>2</sub>O y para-H<sub>2</sub>O entre 40  $\mu$ m y 183 GHz. El modelo calcula las poblaciones de los niveles rotacionales en equilibrio estadístico para las dos especies de agua. Los coeficientes colisionales adoptados son los de Green *et al.* 1993 y se consideran la excitación de los niveles rotacionales por la emisión del continuo de una forma consistente suponiendo que las moléculas de agua y los granos de polvo coexisten. El espectro emergente se calcula resolviendo la transferencia de radiación no-local en un conjunto de parámetros de impacto. Para ello, se ha discretizado la *envoltura* en 41 capas. Los perfiles de línea obtenidos se han convolucionado con la resolución angular del LWS ( $\sim 80''$ ). La resolución espectral de los perfiles de H<sub>2</sub>O resultantes es  $1 \text{ km s}^{-1}$  ya que no se ha convolucionado con la resolución espectral del FP. Se han calculado modelos para densidades de columna de agua de  $1.8\times 10^{16}$ ,  $9\times 10^{17}$  y  $1.8\times 10^{18} \text{ cm}^{-2}$  para cinco temperaturas cinéticas diferentes 40, 100, 200, 300 y 500 K y densidades de H<sub>2</sub> desde  $5\times 10^3$  hasta  $6.4\times 10^5 \text{ cm}^{-3}$  en pasos de 2. Los modelos se muestran en las FIGS. 4.9, 4.10 y 4.11.

El principal problema para la interpretación de las observaciones de H<sub>2</sub>O en Sgr B2 es la elevada opacidad de las líneas de agua en el IR-lejano ( $\sim 10^3$ ) pudiendo ser mayor que  $\sim 10^4$  en la línea fundamental a  $\sim 179 \mu\text{m}$ . Desafortunadamente, para las líneas detectadas con ISO y el rango de parámetros físicos posibles en la envoltura de Sgr B2(M), los modelos son prácticamente insensibles a la temperatura cinética. Para densidades de columna menores que  $\sim 10^{17} \text{ cm}^{-2}$  y temperaturas menores que  $\sim 200$  K tampoco se puede distinguir fácilmente entre modelos de diferentes densidades. Las cotas a estos parámetros hay que buscarla en líneas débiles a longitudes de onda menores que  $\sim 70 \mu\text{m}$  o transiciones en submilimétricas que sólo podrán ser observadas con la siguiente generación de telescopios espaciales.



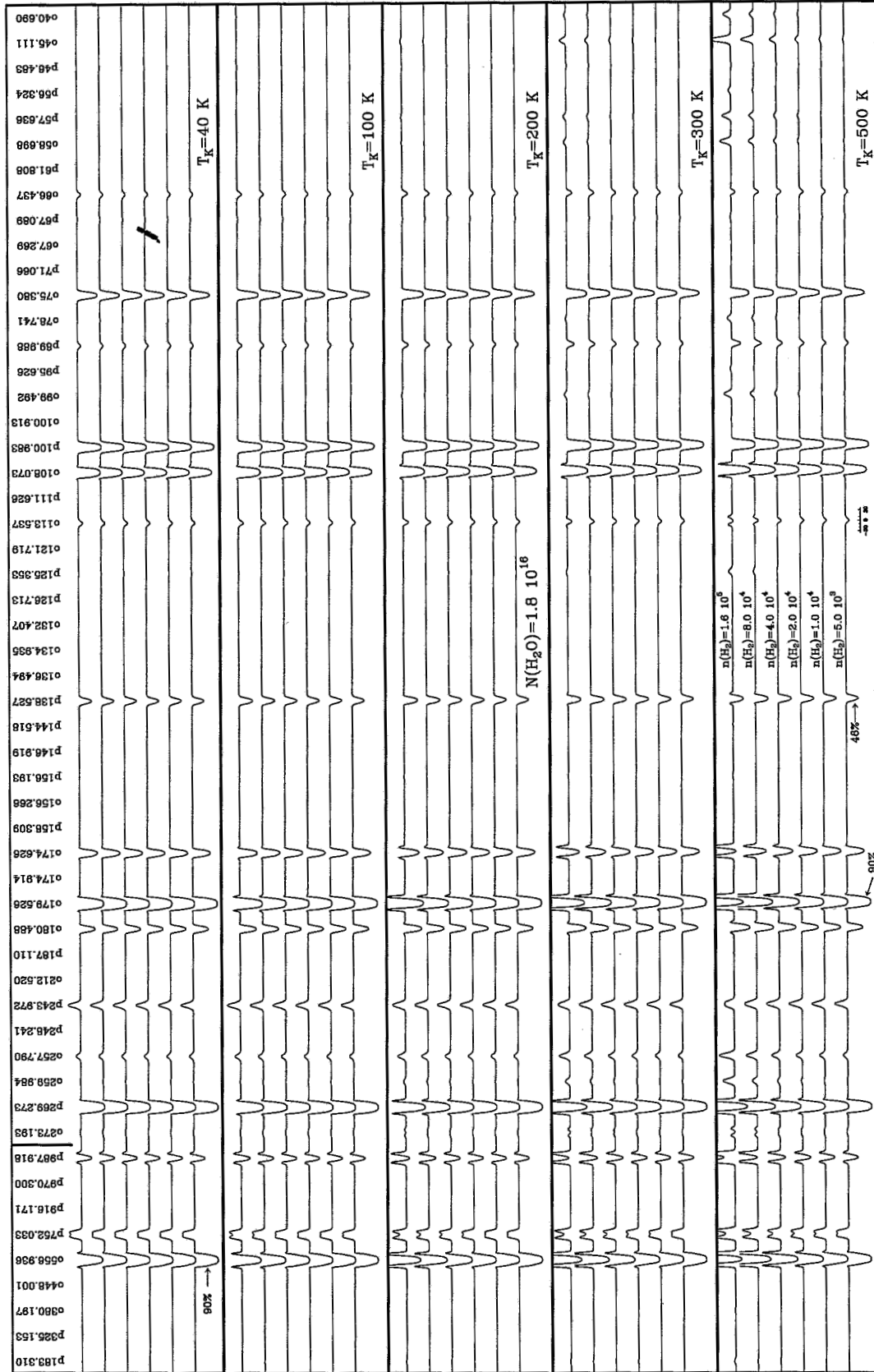


FIGURA 4.9: Algunos modelos no-locales de H<sub>2</sub>O en Sgr B2(M). La columna de densidad de agua es  $1.8 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ . Se muestran modelos para temperaturas cinéticas,  $T_k$ , variando entre 40 y 500 K y densidades,  $n(\text{H}_2)$ , variando entre  $5 \times 10^3$  y  $1.6 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$ .



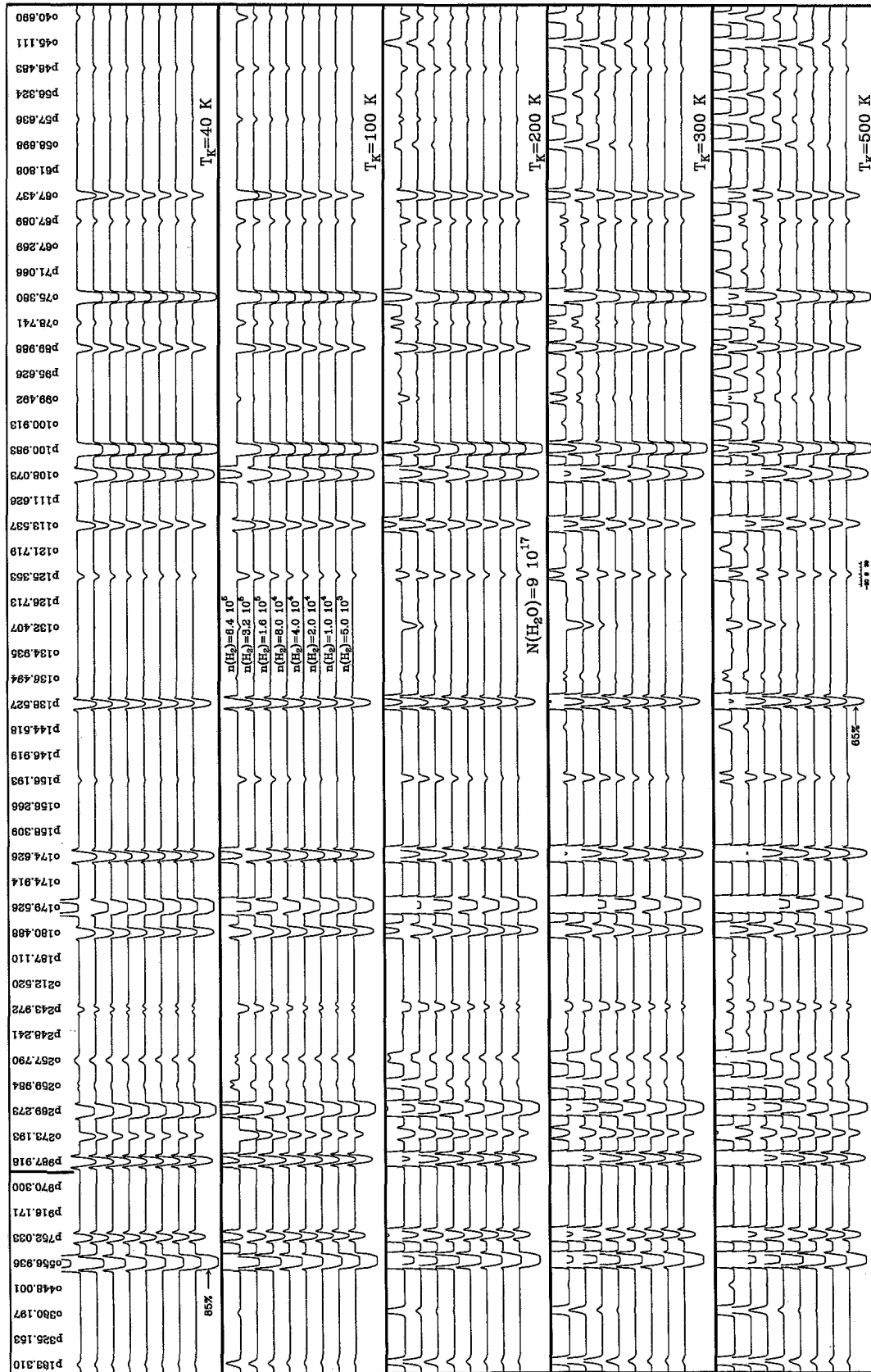


FIGURA 4.10: Algunos modelos no-locales de  $\text{H}_2\text{O}$  en Sgr B2(M). La columna de densidad de agua es  $9.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ . Se muestran modelos para temperaturas cinéticas,  $T_k$ , variando entre 40 y 500 K y densidades,  $n(\text{H}_2)$ , variando entre  $5 \times 10^3$  y  $6.4 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$ .

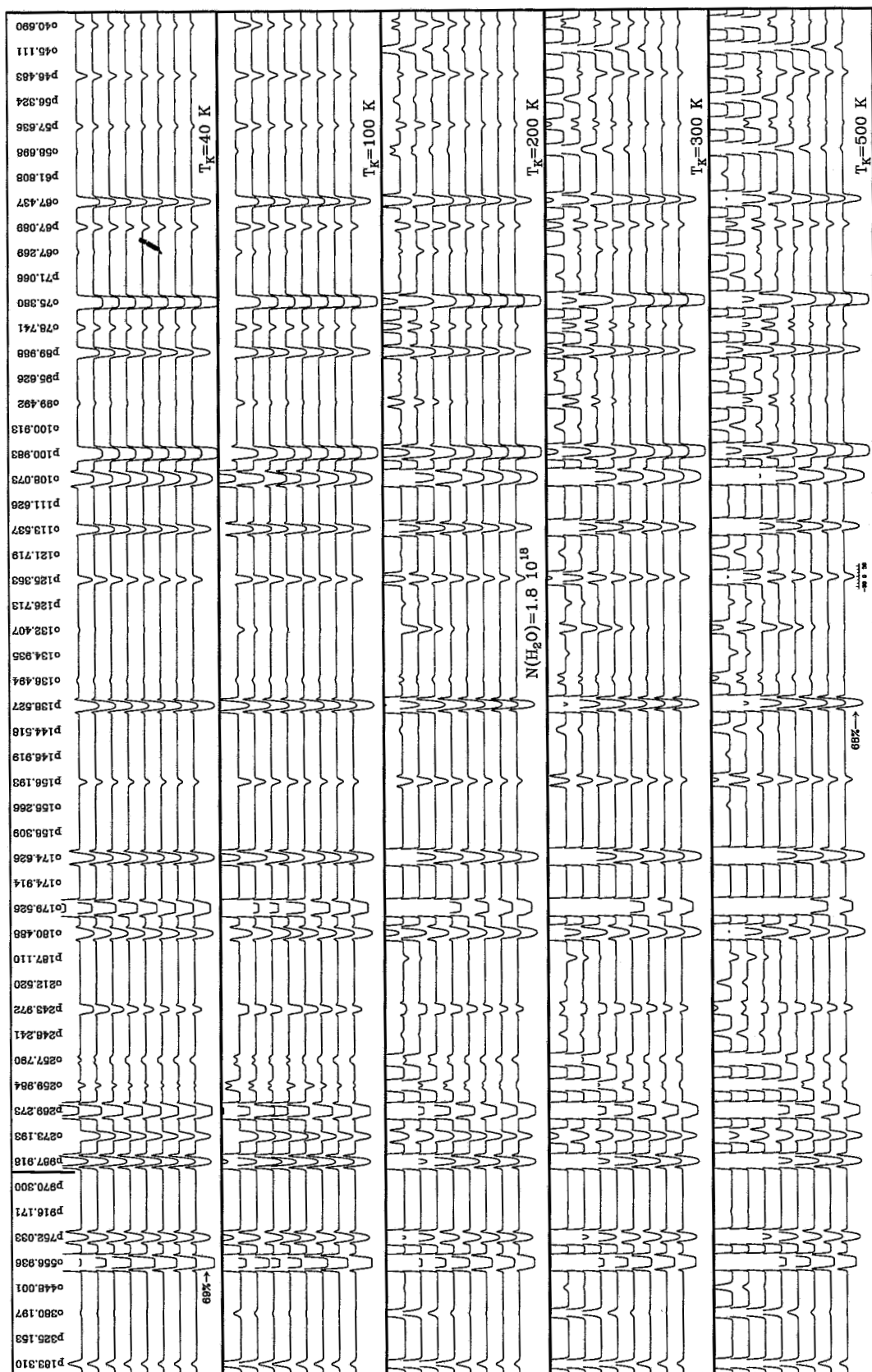


FIGURA 4.11: Algunos modelos no-locales de  $\text{H}_2\text{O}$  en Sgr B2(M). La columna de densidad de agua es  $1.8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-2}$ . Se muestran modelos para temperaturas cinéticas,  $T_k$ , variando entre 40 y 500 K y densidades,  $n(\text{H}_2)$ , variando entre  $5 \times 10^3$  y  $6.4 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$ .

En relación con las líneas de agua predichas por los modelos de mayor densidad de columna de  $\text{H}_2\text{O}$  (FIGS. 4.10 y 4.11), las líneas rotacionales a  $\sim 56.3$ ,  $\sim 57.6$ ,  $\sim 58.7$ ,  $\sim 78.7$ ,  $\sim 99.5$ ,  $\sim 125.4$  y  $\sim 136.5 \mu\text{m}$  no han sido detectadas (a la sensibilidad del LWS/FP), lo que indica que que  $N(\text{H}_2\text{O}) < 10^{17} \text{ cm}^{-2}$  en la envoltura de Sgr B2 (M). La línea a  $\sim 156.2 \mu\text{m}$  predicha en los modelos de mayor densidad de columna está contaminada por la línea Q(8) de  $\text{C}_3$  (también predicha en los modelos de  $\text{C}_3$  de la SEC. 4.6.4). Desafortunadamente, no existen datos para las transiciones a  $\lambda \leq 46 \mu\text{m}$  predichas por los modelos de elevada densidad de columna.

En cuanto a la cota inferior de  $N(\text{H}_2\text{O})$ , el modelo de la FIG. 4.9 está en buen acuerdo con las líneas observadas con ISO (detectadas o no) a excepción de la línea a  $\sim 67.1 \mu\text{m}$ , que es demasiado débil en este modelo. Considerando este modelo como la cota mínima para la cantidad de agua y teniendo en cuenta las incertidumbres en la geometría del modelo y en la calibración de la absorción de las líneas se deriva un valor de  $N(\text{H}_2\text{O}) = (3 \pm 2) \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ .

Los modelos en este rango de densidades de columna no permiten determinar con exactitud los parámetros físicos de la región absorbente de vapor de agua. En principio, tanto la envoltura ambiente de densidad moderada ( $T_k \sim 40 \text{ K}$ ;  $n(\text{H}_2) \sim 10^5 \text{ cm}^{-3}$ ) como la envoltura más caliente y difusa ( $T_k \sim 100 \text{ K}$ ;  $n(\text{H}_2) < 10^4 \text{ cm}^{-3}$ ) pueden ser las responsables de la absorción de vapor de agua observada en el IR-lejano.

## FORMACIÓN Y DESTRUCCIÓN DEL VAPOR DE AGUA

Suponiendo que tanto el vapor de agua como el  $\text{H}_3\text{O}^+$  presentado en la SEC. 4.3 surgen de la misma región, se ha determinado un cociente de densidades de columna  $[\text{H}_2\text{O}]/[\text{H}_3\text{O}^+] \sim 200$ . Los modelos químicos con un *branching ratio* de 0.35 para el canal de disociación del agua (*p.ej.*, Millar *et al.* 1991) predicen un cociente  $[\text{H}_2\text{O}]/[\text{H}_3\text{O}^+] \simeq 500-2000$  para las condiciones típicas de una nube molecular. Para este cálculo teórico se asume que todo el agua en fase gaseosa se forma únicamente a partir de la recombinación disociativa de  $\text{H}_3\text{O}^+$ . Cualquier otro mecanismo de formación de  $\text{H}_2\text{O}$  existente en la región tenderá a aumentar esta predicción teórica.

Los resultados observacionales en Sgr B2(M) muestran sin embargo que la abundancia del vapor de agua está por debajo de la cota mínima predicha para su formación exclusiva a partir de la recombinación disociativa de  $\text{H}_3\text{O}^+$ . En otras palabras, existe algún mecanismo efectivo en las regiones más externas de la nube que reduce la densidad de columna de  $\text{H}_2\text{O}$  en fase gaseosa predicha por los modelos químicos. A las bajas densidades y moderadas temperaturas de la región absorbente trazada por las observaciones en el IR-lejano, es improbable que la depleción de agua en mantos de hielo sobre los granos de polvo sea efectiva. Incluso se ha propuesto el mecanismo inverso (la liberación de las moléculas de los mantos de hielo y retorno a la fase gaseosa) producido por la acción de choques de baja velocidad, como proceso dominante en la inyección de SiO o  $\text{NH}_3$  al gas de Sgr B2 (*p.ej.*, Flower *et al.* 1995).

Es muy posible que la disminución del vapor de agua en la envoltura de Sgr B2 esté provocada por la fotodisociación de las moléculas de  $\text{H}_2\text{O}$  producida por un intenso campo de radiación UV o por los efectos (más difíciles de cuantizar) de un campo de rayos-X (véase el final de la SEC. 3.2.2). El efecto de la radiación sobre la química en la envoltura de Sgr B2 no ha sido casi tenido en cuenta en la literatura. La presencia de PDRs o XDRs asociadas, dejarán forzosamente otras huellas en las abundancias moleculares y emisión atómica e iónica de la región. Por ejemplo, la fotodisociación del vapor de agua llevaría asociado un aumento considerable de la densidad de columna de su producto dominante, OH, mediante  $\text{H}_2\text{O} + h\nu \rightarrow \text{OH} + \text{H}$ .

## 4.5 EMISIÓN FLUORESCENTE DE OH

En esta sección se presenta un análisis de la absorción/emisión producida por  $^{16}\text{OH}$  y  $^{18}\text{OH}$  en el espectro IR-lejano de Sgr B2(M). En las líneas rotacionales que provienen del nivel fundamental, además de la absorción asociada a Sgr B2 también se ha detectado la absorción producida por las nubes difusas situadas en la línea de mirada. A la resolución de las observaciones LWS/FP casi todos los dobletes- $\Lambda$  de OH aparecen resueltos. El número de líneas detectadas ha permitido realizar modelos no-locales de la transferencia de radiación y caracterizar las propiedades físicas de las regiones más externas de la envoltura de Sgr B2. La elevada abundancia de OH encontrada está efectivamente relacionada con los (poco documentados) efectos del campo de radiación UV y la fotodisociación del agua en la envoltura caliente.

### 4.5.1 INTRODUCCIÓN

Como se ha visto en el CAP. 3, Sgr B2(M) aparece como la condensación más brillante en el IR-lejano del complejo. Su diámetro es aproximadamente de  $40''$  (Goldsmith *et al.* 1992). Los diferentes estudios existentes en la literatura han mostrado que el núcleo de Sgr B2(M) está rodeado por una extensa envoltura de gas caliente caracterizada por ser poco homogénea y rica en condensaciones. Sin embargo, estos estudios aún no han establecido cual es el origen de la diversidad química encontrada y los mecanismos de calentamiento dominantes.

Para explicar la elevada abundancia de especies nitrogenadas como  $\text{NH}_2$  o  $\text{NH}_3$  se ha sugerido que el calentamiento a gran escala podría estar dominado por choques de baja velocidad de *tipo-C* (Flower, Pineau des Forêts & Walmsley 1995). Por otra parte, la radiación UV podría tener un importante efecto para el gas, especialmente en medios tan poco homogéneos como la envoltura de Sgr B2. Sin embargo, históricamente se ha argumentado que la componente de gas molecular caliente es consecuencia de mecanismos de calentamiento *mecánicos* y no de mecanismos *radiativos*. Las observaciones procedentes de ISO muestran que la emisión de iones como  $[\text{OIII}]$  o  $[\text{NIII}]$  es extensa en Sgr B2 (véase el CAP. 5). En otro posible escenario donde la radiación juegue un importante papel para las regiones externas de la nube, la ionización de la envoltura de Sgr B2 provocará la formación de regiones de fotodisociación (PDRs).

En cualquiera de los dos escenarios (o en una combinación de ambos), las especies *originadas*  $\text{H}_2\text{O}$ , OH y  $\text{O}^0$  son decisivas para el balance térmico del gas (Neufeld *et al.* 1995). En particular se predice que el radical OH sea abundante en los dos escenarios.

La estructura de los niveles de rotacionales de OH aparece en la FIG. 4.12. Las líneas asociadas a las transiciones hiperfinas del nivel fundamental  $^2\Pi_{3/2}$   $J=3/2$  a 18 cm han sido utilizadas frecuentemente para estudiar multitud de nubes interestelares y circunestelares, en particular aquellas del CG como Sgr B2 (*p.ej.*, Bieging 1976; Whiteoak & Gardner 1981; Burjarbal *et al.* 1983). Estas líneas aparecen absorbiendo el continuo *libre-libre* asociado a las regiones HII del complejo.

La primera detección del doblete- $\Lambda$  correspondiente al nivel rotacional fundamental ( $\sim 119 \mu\text{m}$ ) fue hacia Sgr B2, esta vez en absorción sobre el continuo producido por el polvo. (Storey, Watson & Townes 1981). Debido a la elevada opacidad de la transición, el doblete a  $119 \mu\text{m}$  absorbe completamente el continuo, impidiendo cualquier comparación con los modelos. El único estudio sistemático de varias líneas rotacionales de OH se ha realizado en las regiones sometidas a intensos choques de Orion mediante análisis LVG (Watson *et al.* 1985; Viscuso *et al.* 1985; Melnick *et al.* 1987, 1990; Betz & Boreiko 1989).

Desde el punto de vista teórico, se han realizado cálculos detallados *ab initio* de las secciones eficaces de colisión entre OH y H<sub>2</sub> y cálculos en los que se estima el espectro IR-lejano de OH mediante modelos basados en la probabilidad de escape (Offer & van Dishoeck 1992 [OfD92]; Offer, van Hemert & van Dishoeck 1994 [OfHD94]). Estos autores predijeron la existencia de fuertes asimetrías en la intensidad resultante de los dobletes- $\Lambda$  en el IR-lejano debido a ciertas asimetrías en las tasas de colisión entre OH y para-H<sub>2</sub>.

En esta sección se presentan observaciones de alta resolución ( $\sim 35 \text{ km s}^{-1}$ ) en el IR-lejano de dobletes- $\Lambda$  de OH que incluyen niveles rotacionales de hasta  $\sim 420 \text{ K}$ . Todas líneas pertenecientes a la escalera  $^2\Pi_{1/2}$  aparecen en emisión, mientras que el resto aparecen en absorción. Estas observaciones han sido modeladas usando un código de transporte de radiación no-local (ver 2.4.2) que consigue acotar algunos importantes parámetros físicos de las capas calientes más externas de la envoltura de Sgr B2 y del gas en la línea de mirada hacia el CG.

### 4.5.2 OBSERVACIONES Y REDUCCIÓN DE DATOS

La mayoría de las líneas rotacionales de OH aparecen en el rango espectral del IR-lejano proporcionado por el instrumento LWS (Clegg *et al.* 1996). Los TDTs utilizados en estas observaciones han sido los: 32201429, 32600502, 46201118 46201123, 46701803, 47600809, 47608099, 49401705, 50400823, 50601013, 50600603, 50700610, y 84500102. La resolución espectral del LWS/FP,  $0.015 \mu\text{m}$  ( $\sim 35 \text{ km s}^{-1}$ ), permite resolver la mayoría de dobletes- $\Lambda$  involucrados en los primeros niveles rotacionales de OH y sus isótopos. Dada la abundancia de H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> en Sgr B2(M) (ver SEC. 4.3) se propuso la búsqueda de varias líneas de OH, tanto de las escaleras  $^2\Pi_{1/2}$  y  $^2\Pi_{3/2}$  como de las líneas *cross ladder*. Los dobletes- $\Lambda$  encontrados se muestran en la FIG. 4.12. El doblete *cross ladder*  $J=5/2 \leftarrow 3/2$  a  $\sim 34 \mu\text{m}$  fue observado con el instrumento SWS (de Graauw *et al.* 1996) también abordo de ISO con una resolución de  $\sim 300 \text{ km s}^{-1}$ . Una de las dos componentes fue observada con el FP a una resolución de  $\sim 10 \text{ km s}^{-1}$  (TDT 46001217).

El flujo del continuo medido con el LWS/FP en cada línea se diferenciaba en un  $\sim 20 \%$  del flujo del continuo medido con el grating a las mismas longitudes de onda. Este valor es similar a los errores de calibración del flujo en el grating (Swinyard *et al.* 1998). Las incertidumbres sistemáticas son superiores a los errores estadísticos asociados a la señal sobre ruido (S/R) de los espectros. La mejor calibración se obtiene corrigiendo el flujo del continuo FP al mismo nivel que el medido con el grating. En todas las líneas se sustrajo una línea de base polinómica que se adoptó como nivel de continuo. La apertura del instrumento LWS es circular y con un tamaño de  $\sim 80''$ , mientras que la apertura del SWS en el rango de  $\sim 34 \mu\text{m}$  es de  $17'' \times 40''$ . Las observaciones fueron procesadas con la versión 10.1 del IDA y analizadas con ISAP.

## RESULTADOS

Sgr B2(M) ha sido objeto de numerosas observaciones espectroscópicas con ISO. Hasta la detección de OH, todas las líneas moleculares aparecían en absorción (ver FIG. 4.2). Sin embargo, OH muestra un comportamiento diferente. La FIG. 4.12 muestra que las líneas rotacionales que conectan el estado fundamental de la escalera  $^2\Pi_{3/2}$  en  $^{16}\text{OH}$  con los niveles rotacionales de la escalera  $^2\Pi_{1/2}$  (a  $\sim 34, 53, 79$  y  $119 \mu\text{m}$ ) aparecen en absorción, mientras que las líneas rotacionales de la escalera  $^2\Pi_{1/2}$  (a  $\sim 98$  y  $\sim 163 \mu\text{m}$ ) aparecen en emisión.

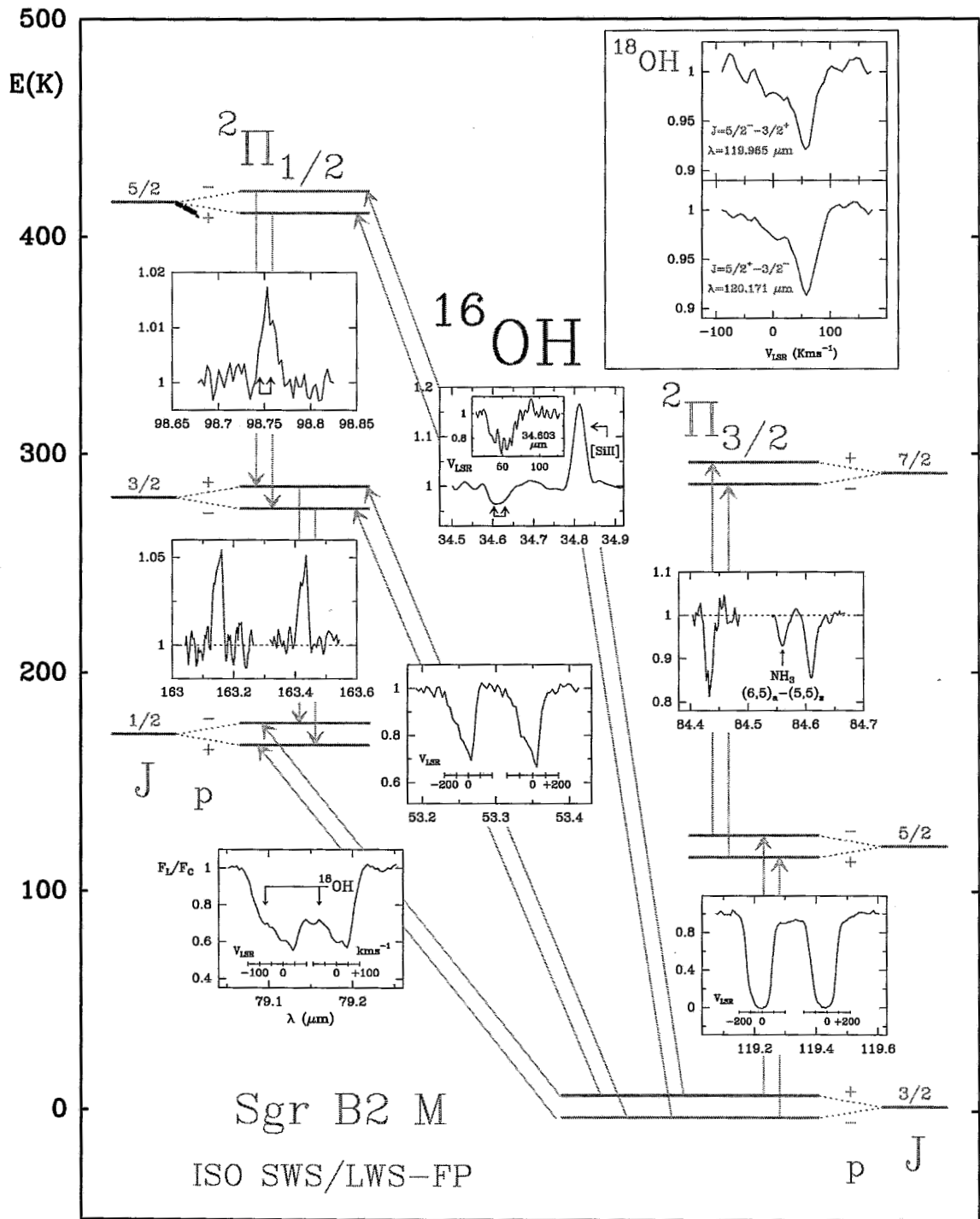


FIGURA 4.12: Observaciones ISO de  $^{16}\text{OH}$  y  $^{18}\text{OH}$  hacia Sgr B2(M) y diagrama de niveles rotacionales de  $^{16}\text{OH}$ . Las dos escaleras de niveles rotacionales  $2\Pi_{3/2}$  y  $2\Pi_{1/2}$  son debidas a la interacción spin-órbita de la molécula. El doblamiento- $\Lambda$  de cada nivel rotacional ha sido exagerado. La estructura hiperfina de los niveles rotacionales no se ha incluido. La escala de las ordenadas corresponde a  $F_L/F_c$  y la abscisa a la longitud de onda en micras. Si las líneas aparecen sólo a la velocidad de Sgr B2 ( $\approx +50 \text{ km s}^{-1}$ ), la escala en velocidades LSR no se muestra. El doblete  $2\Pi_{3/2}$   $J=5/2 \leftarrow 3/2$  de  $^{18}\text{OH}$  se muestra en la caja superior derecha.

### 4.5.3 OH EN LAS NUBES DIFUSAS DE LA LÍNEA DE MIRADA

Los dobletes- $\Lambda$  a  $\sim 79$  y  $\sim 53$   $\mu\text{m}$  tienen absorciones máximas a la velocidad frecuentemente observada para Sgr B2(M) en el IR-lejano ( $V_{LSR} \simeq +50$   $\text{km s}^{-1}$ ). Además, existe una contribución del gas situado en la línea de mirada y que produce absorción a velocidades más negativas (hasta  $\simeq -110$   $\text{km s}^{-1}$ ). Dada la resolución del LWS/FP es conveniente dividir el intervalo asociado al gas no relacionado con Sgr B2 en dos componentes ( $\simeq -85$  y  $\simeq 0$   $\text{km s}^{-1}$ ). El rango típico de densidades  $n(\text{H}_2)$  encontrado en la nubes de los brazos espirales y en el gas que rodea al CG varía entre  $10^2$  y  $10^4$   $\text{cm}^{-3}$  (véase la SEC. 3.2.5).

La profundidad de la absorción a  $V_{LSR} \simeq -85$   $\text{km s}^{-1}$  de los dobletes a  $\sim 79$  y  $\sim 53$   $\mu\text{m}$  es de  $\sim 30\%$  y  $\sim 15\%$  respectivamente. Se piensa que esta componente está dominada por el gas molecular contenido en el kpc central de la galaxia (Scoville 1975). Asumiendo que la absorción en las líneas *cross ladder* para este rango de velocidades es ópticamente delgada, y considerando únicamente excitación radiativa (*i.e.* baja  $T_{ex}$ ), se deriva una abundancia de  $\chi(\text{OH}) \simeq 10^{-6}$  para una densidad de columna de  $N(\text{H}_2) \simeq (5-10) \times 10^{21}$   $\text{cm}^{-2}$  (véase Neufeld *et al.* 2000).

La opacidad de las líneas *cross ladder* a  $V_{LSR} \simeq 0$   $\text{km s}^{-1}$  permite también determinar la abundancia de OH en esta componente. La contribución a estas velocidades procede fundamentalmente de las nubes difusas en un radio galactocéntrico de 5-8 kpc y en el gas situado en la vecindad solar. Además, puede que exista una pequeña contribución de Sgr B2. Para una densidad de columna de  $N(\text{H}_2) \simeq 2.5 \times 10^{22}$   $\text{cm}^{-2}$  (Neufeld *et al.* 2000) se deriva  $\chi(\text{OH}) \simeq 5 \times 10^{-7}$ .

Estas abundancias de OH inferidas en el IR-lejano son ligeramente superiores a las encontradas en el UV en nubes difusas y translúcidas, ( $\sim 10^{-7}$ ; van Dishoeck & Black 1986).

Finalmente se han detectado las líneas fundamentales  $^2\Pi_{3/2}$   $J=5/2 \leftarrow 3/2$  de  $^{18}\text{OH}$  a  $\sim 120$   $\mu\text{m}$ . Además de la absorción centrada a las velocidades de Sgr B2, existe otra componente en absorción centrada a  $V_{LSR} \simeq 0$   $\text{km s}^{-1}$ . La densidad de columna de  $^{18}\text{OH}$  que se encuentra para esta componente es de  $(2.5 \pm 0.5) \times 10^{13}$   $\text{cm}^{-2}$ , lo que implica un cociente de abundancias  $^{16}\text{OH}/^{18}\text{OH} \simeq 500$ , similar al cociente isotópico  $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$  terrestre.

Los dobletes- $\Lambda$  a  $\sim 84$  y  $\sim 34$   $\mu\text{m}$  (en absorción) y los dobletes- $\Lambda$  de la escalera  $^2\Pi_{1/2}$  a  $\sim 98$  y  $\sim 163$   $\mu\text{m}$  (en emisión) aparecen estrictamente asociados a Sgr B2, sin contribución del gas en la línea de mirada. Las observaciones con ISO proporcionan además límites superiores de  $\sim 1.5\%$  (para la sensibilidad del LWS) a la absorción/emisión de las líneas *cross ladder*  $J=3/2 \rightarrow 5/2$  ( $\sim 96$   $\mu\text{m}$ ) y  $J=5/2 \rightarrow 5/2$  ( $\sim 48$   $\mu\text{m}$ ) y a las líneas  $^2\Pi_{3/2}$   $J=9/2 \leftarrow 7/2$  ( $\sim 65$   $\mu\text{m}$ ) y  $^2\Pi_{1/2}$   $J=7/2 \rightarrow 5/2$  ( $\sim 71$   $\mu\text{m}$ ). Los futuros telescopios que operen en el IR-lejano podrán observar estas otras líneas de OH y confirmar/descartar su presencia.

### 4.5.4 OH EN SGR B2(M): MODELOS NO-LOCALES

La abundancia típica de OH en nubes moleculares oscuras es de  $(0.1-1) \times 10^{-7}$ , mientras que el cociente  $\text{OH}/\text{H}_2\text{O}$  está en el rango 1-0.01 (Bergin, Langer & Goldsmith 1995). Los modelos químicos predicen que se podrían encontrar abundancias de OH superiores en regiones donde el vapor de agua fuera rápidamente fotodisociado (Sternberg & Dalgarno 1995) o en regiones sometidas a frentes de choques *tipo-C* (Draine, Roberge & Dalgarno 1983). Para el caso de Sgr B2 y debido a la gran opacidad del continuo, las regiones internas de la nube están completamente oscurecidas en el IR-lejano y -medio. De esta forma, casi todo el OH observado proviene de las capas más superficiales, *i.e.* la extensa envoltura.

Con el objetivo de estimar la columna de densidad y abundancia de OH así como las condiciones físicas del gas en Sgr B2 donde se produce la absorción/emisión, se ha adaptado el código numérico (véase 2.4.2) desarrollado por González-Alfonso & Cernicharo (1993) a los 20 primeros niveles rotacionales de OH. El modelo sólo tiene en cuenta la estructura rotacional de los dobletes- $\Lambda$  ignorando la estructura hiperfina de OH. Se han utilizado las secciones eficaces de colisión de OfHD94 proporcionadas en formato electrónico por E.F. van Dishoeck.

Para el modelo de OH en Sgr B2(M) se ha adoptado una nube con geometría esférica (SEC. 2.4.2) de dos componentes (FIG. 4.13):

- Un *núcleo* uniforme con un diámetro de  $25''$  ( $\sim 1$  pc para una distancia de 8.5 kpc), con temperatura de polvo  $T_{polvo}=30$  K (véase la SEC. 4.2) y una opacidad a  $80 \mu\text{m}$  de 5 (para una ley de opacidad en el continuo dada por  $\tau_\lambda = \tau_{80} \times [80/\lambda]$ )
- Una *envoltura* dividida en 14 capas de profundidad y distancia al *núcleo* variable.

Todas las transiciones moleculares en el *núcleo* están termalizadas a la temperatura del polvo debido a la opacidad del polvo en el IR-lejano. Para unas dimensiones fijas los parámetros fijos de la *envoltura* son: la densidad  $n(H_2)$ , la temperatura cinética  $T_k$  y la densidad de columna  $N(OH)$ . Para comprobar las variaciones de los modelos respecto a los parámetros físicos se hicieron hasta 144 modelos que variaban  $n(H_2)$ ,  $T_k$  y  $N(OH)$  desde  $10^3$  a  $10^5 \text{ cm}^{-3}$ , 40 a 600 K y  $1 \times 10^{15}$  a  $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ , respectivamente. En el APÉNDICE A se muestran los resultados de algunos de estos modelos.

El modelo tiene en cuenta que las temperaturas de excitación para las transiciones *cross ladder* y aquellas de la escalera  $^2\Pi_{3/2}$  tienen que ser menores que la temperatura del polvo para que las líneas correspondientes aparezcan en absorción. Las observaciones de OH con ISO proporcionan algunas interesantes cotas para el tamaño y densidad de la *envoltura*. En particular, la profundidad de la *envoltura* y su separación respecto del *núcleo* no pueden ser elevadas en comparación con las propias dimensiones del *núcleo*. De lo contrario, se comprueba que el modelo introduce fuertes "efectos de limbo" que se traducen en un aumento de la remisión de OH en la *envoltura* que cancela la absorción del gas situado delante del *núcleo*.

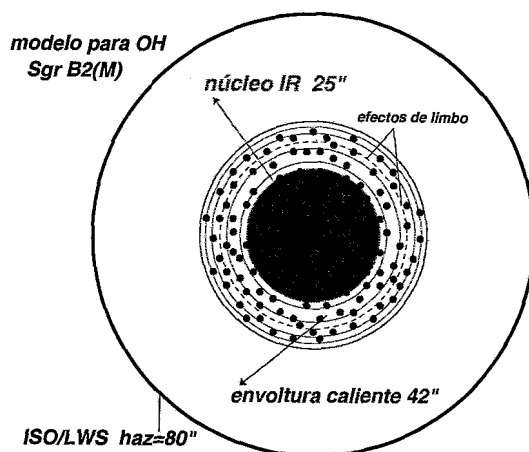


FIGURA 4.13: Esquema del modelo geométrico para OH en Sgr B2(M). El círculo grueso externo representa aproximadamente el haz del telescopio para el instrumento LWS/Fabry-Perot.



Del análisis de los modelos se concluye que si la *envoltura* está situada a cierta distancia del *núcleo*, los "efectos de limbo" provocan que la mayoría de las líneas aparezcan en emisión (dentro del haz de  $\sim 80''$ ). Incluso situándola adyacente al *núcleo* pero con una profundidad considerable, las líneas aparecen en emisión. En la FIG. 4.14 se presentan los resultados para 3 modelos representativos con dimensiones apropiadas *envoltura* + *núcleo* de  $42''$  ( $\sim 1.7$  pc).

### MODELO M<sub>1</sub>

El modelo M<sub>1</sub> corresponde a  $T_k=40$  K,  $n(H_2)=10^4$  cm<sup>-3</sup> y  $\chi(OH) = 2 \times 10^{-6}$ . Las líneas *cross ladder* y líneas de la escalera  $^2\Pi_{3/2}$  aparecen en absorción, mientras que las líneas de la escalera  $^2\Pi_{1/2}$  se predicen en emisión. Aunque la intensidad de las líneas en absorción parece coherente con la de las observaciones, la intensidad de las líneas en emisión están subestimadas. La línea  $^2\Pi_{1/2} J=5/2 \rightarrow 3/2$  a  $\sim 98$   $\mu$ m está particularmente subestimada en este modelo. El aumento la abundancia de OH para ajustar mejor las líneas en emisión tiene como consecuencia la disminución de la intensidad de las líneas en absorción. Esto se debe a que los efectos de limbo comienzan a dominar. Estos efectos son ya visibles en las alas en emisión en la línea *cross ladder*  $J=1/2 \leftarrow 3/2$  a  $\sim 79$   $\mu$ m. Al aumentar la temperatura cinética del gas, las colisiones de OH con H<sub>2</sub> comienzan a bombear los niveles rotacionales excitados de OH y la intensidad de la línea a  $\sim 98$   $\mu$ m puede ser ajustada satisfactoriamente. Sin embargo, el bombeo colisional a temperaturas elevadas introduce fuertes asimetrías en las intensidades de las dos componentes de un mismo doblete- $\Lambda$ . A la S/R de las observaciones con el FP no se observa asimetrías en ningún doblete. Estas asimetrías fueron ya predichas por OfD92 y están debidas a una fuerte tendencia al cambio de paridad debida a las colisiones con para-H<sub>2</sub>. Las asimetrías se pueden reducir sólo si el cociente orto/para aumenta o si el bombeo radiativo domina. Puesto que la fuerte extinción de Sgr B2 en el IR-medio dificultan las observaciones de H<sub>2</sub> se ha adoptado un cociente orto/para igual a 3.

### MODELO M<sub>2</sub>

El modelo M<sub>2</sub> en la FIG. 4.14 muestra el efecto del aumento de la temperatura cinética ( $T_k=150$  K) en la emisión/absorción de OH. El resto de parámetros son idénticos a los de M<sub>1</sub>. En comparación con el modelo de baja temperatura, la intensidad de las líneas del doblete a  $\sim 98$   $\mu$ m aumenta considerablemente. La asimetría de las componentes del doblete no puede ser comparada con las observaciones puesto que a la resolución del FP el doblete- $\Lambda$  no está resuelto. Se ha comprobado que el bombeo IR reduce fuertemente las asimetrías presentes en el resto de dobletes- $\Lambda$  en modelos que no incluían la presencia del *núcleo* ópticamente espeso.

### MODELO M<sub>3</sub>

Finalmente, el modelo M<sub>3</sub> (curvas gruesas en la FIG. 4.14) corresponde a un modelo con  $T_k=300$  K,  $n(H_2)=5 \times 10^3$  cm<sup>-3</sup> y  $\chi(OH) = 3 \times 10^{-6}$ . Aunque el doblete a  $\sim 98$   $\mu$ m no está resuelto, la intensidad total del doblete observada es compatible con la del modelo. El modelo M<sub>3</sub> reproduce satisfactoriamente el patrón observado en el resto de las líneas excepto en las alas de las líneas *cross ladder* a 119 y 79  $\mu$ m producidas por los efectos de limbo. Sin embargo, la presencia de una fracción considerable de OH frío en las nubes en la línea de mirada (véase la SEC. 4.5.3) no incluida en los modelos, absorbe a estas longitudes de onda (como en M<sub>1</sub>) provocando la reducción de los efectos de emisión en estas líneas.

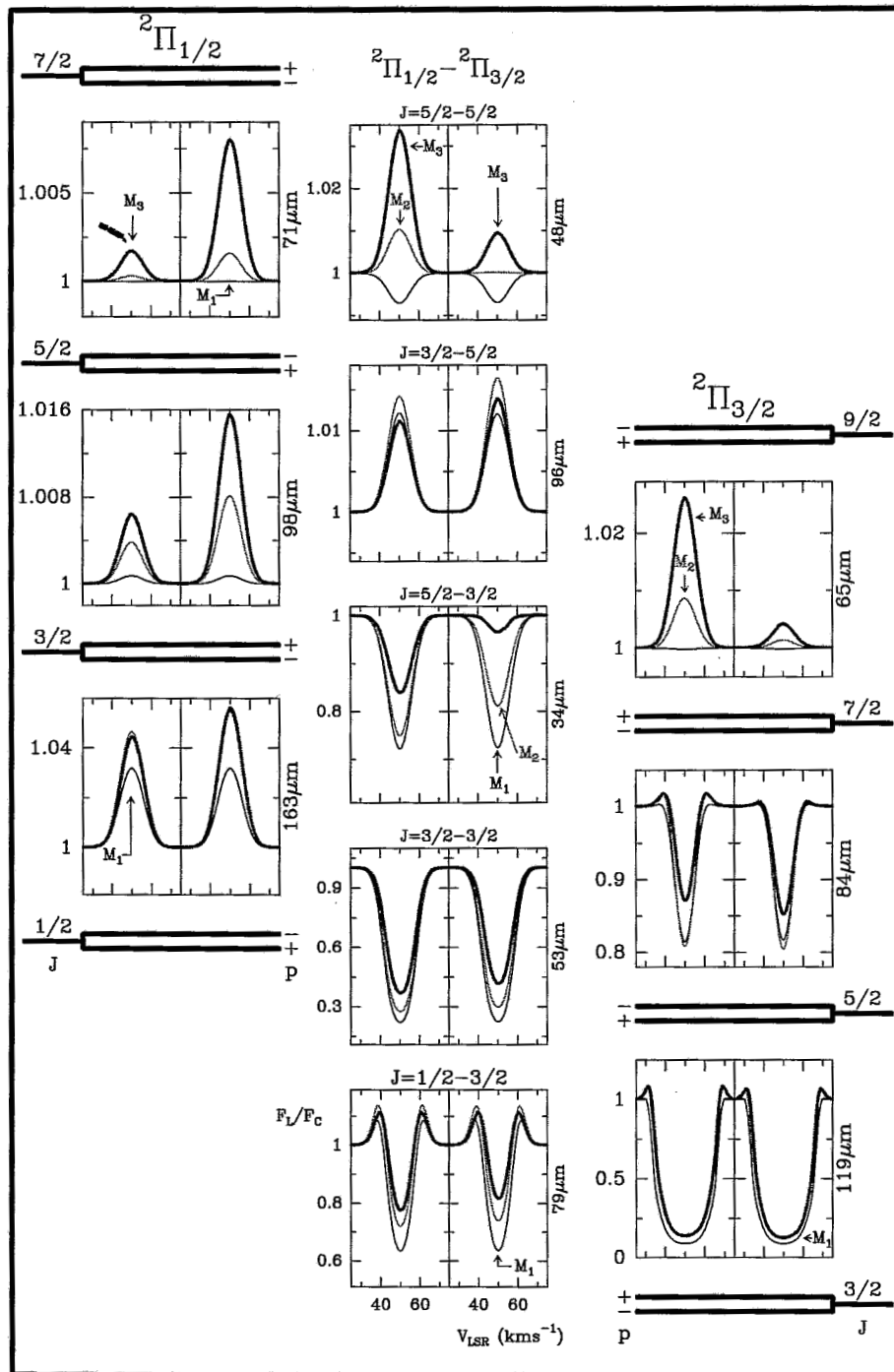


FIGURA 4.14: Algunos de modelos representativos de OH para Sgr B2 ( $V_{LSR} \simeq +50 \text{ km s}^{-1}$ ) discutidos en el texto. Los paneles centrales corresponden a las transiciones cross ladder. Las intensidades de las líneas están normalizadas al flujo del continuo. Las longitudes de onda de cada transición se muestran en la parte derecha de cada panel. El modelo etiquetado como  $M_1$  corresponde a  $T_k=40 \text{ K}$ ,  $n(H_2)=10^4 \text{ cm}^{-2}$ ,  $\chi(OH)=2 \times 10^{-6}$ . El modelo  $M_2$  corresponde a  $T_k=150 \text{ K}$ ,  $n(H_2)=10^4 \text{ cm}^{-2}$ ,  $\chi(OH)=2 \times 10^{-6}$ . El modelo  $M_3$  corresponde a  $T_k=300 \text{ K}$ ,  $n(H_2)=5 \times 10^3 \text{ cm}^{-2}$ ,  $\chi(OH)=3 \times 10^{-6}$ . La resolución de los perfiles de línea es de  $1 \text{ km s}^{-1}$ .

### 4.5.5 DISCUSIÓN

La principal conclusión de los modelos de OH es que el gas más externo de la envoltura de Sgr B2 es caliente y tiene una densidad de  $H_2$  moderada. Además, la abundancia de OH es elevada,  $\chi(OH)=(2-5)\times 10^{-6}$ . Si se asume que el modelo  $M_3$  representa un ajuste razonable a las observaciones de OH con ISO, se concluye que la densidad de columna de la especie isotópica  $^{18}OH$  en Sgr B2 (sólo componente a  $V_{LSR} \simeq +50 \text{ km s}^{-1}$ ) es  $N(^{18}OH)=(6\pm 2)\times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ . Con este dato, se obtiene un cociente isotópico  $^{16}OH/^{18}OH$  para Sgr B2 de 240–280. Este resultado es similar al obtenido por Bujarrabal *et al.* (1983) a partir de las líneas hiperfinas de OH a 18 cm y muestra que el cociente  $^{16}O/^{18}O$  en el CG es un factor  $\sim 2$  menor que el gas que domina la componente a  $V_{LSR} \simeq 0 \text{ km s}^{-1}$ .

Para el gas en la envoltura de Sgr B2 se podrían obtener temperaturas cinéticas mayores. Sin embargo las coeficientes colisionales empleados introducen fuertes asimetrías en las líneas *cross ladder* que no se detectan en las observaciones LWS. Si se aumenta la temperatura por encima de  $T_k=300 \text{ K}$ , la densidad tienen que disminuir por debajo del valor dado por  $M_3$  ( $5\times 10^3 \text{ cm}^{-3}$ ). Esto es necesario porque a altas temperaturas se predice la emisión intensa de líneas rotacionales excitadas no detectadas (*p.ej.*, a  $\sim 71$  y  $\sim 65 \mu\text{m}$ ). Para  $T_k=600 \text{ K}$ , la densidad tiene que ser disminuida hasta  $(1-2)\times 10^3 \text{ cm}^{-3}$  y la abundancia aumentada hasta  $(0.5-1)\times 10^{-5}$  si se quiere obtener un ajuste mínimamente razonable a las observaciones.

Puesto que ningún modelo ajusta exactamente todas las observaciones de OH, se concluye que la representación más adecuada de la estructura física de la frontera externa de Sgr B2 es un gradiente de temperaturas en la envoltura. Desde  $T_k=40 \text{ K}$  en las regiones más internas hasta  $T_k=600 \text{ K}$  en las capas más externas y difusas.

La densidad de columna de  $^{16}OH$  encontrada en la envoltura,  $(1.5-2.5)\times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ , y la determinada para  $H_2^{16}O$  también mediante observaciones en el IR-lejano (SEC. 4.4) implican un cociente  $OH/H_2O=0.1-1$ . Para comparar, los modelos de choques *tipo-C* de Flower *et al.* predicen un cociente  $OH/H_2O \simeq 10^{-3}$ , mientras que los modelos de núcleos oscuros en nubes moleculares densas predicen  $OH/H_2O \simeq 10^{-4}$ . Sin embargo, las abundancias de OH tan elevadas como las encontradas en la envoltura de Sgr B2 son compatibles con las predicciones de los modelos de PDRs (hasta  $\chi(OH) \simeq 10^{-5}$ ), para las regiones donde la formación de OH está dominada por la fotodisociación del agua. En estos modelos se predice que el cociente  $OH/H_2O$  puede adquirir un valor de 10 (*p.ej.*, Sternberg & Dalgarno 1995). La elevada abundancia de OH respecto a  $H_2O$  encontrada sugiere que las regiones más externas de Sgr B2 están siendo iluminadas por un intenso campo de radiación UV capaz de producir PDRs. Estas conclusiones no descartan la presencia de choques de baja velocidad ( $v_S \simeq 30 \text{ km s}^{-1}$ ) que no pueden ser resueltos por las observaciones de ISO, pero sí demuestran que los procesos fotoquímicos en la envoltura de Sgr B2 son más importantes de lo que se pensaba.

En este nuevo escenario, multitud de especies moleculares formadas durante la evolución del gas frío en Sgr B2 están siendo ahora reprocesadas en las regiones externas. El gas molecular caliente asociado no se traza fácilmente mediante observaciones milimétricas pero representa la mayor contribución a la absorción/emisión de OH en el espectro IR-lejano de Sgr B2.

Los futuros telescopios espaciales como *Herschel* proporcionarán observaciones muy rápidas de varias transiciones rotacionales de OH, convirtiéndola en una útil herramienta para derivar las condiciones físicas de las nubes del CG y de otros núcleos extragalácticos.

## 4.6 DETECCIÓN DE C<sub>3</sub> EN EL ISM

En esta sección se presenta la primera detección del radical lineal C<sub>3</sub> en el ISM. El carbono triatómico juega un importante papel dentro de la familia de las cadenas lineales y cumulenos de carbono (C<sub>n</sub>). Para la química interestelar, la determinación de su abundancia es fundamental para comprender la síntesis de hidrocarburos complejos en el espacio. Actualmente se cree que este tipo de moléculas son los "ladrillos" fundamentales a partir de los cuales se formarán los grandes agregados moleculares ricos en carbono responsables de la emisión en las *bandas infrarrojas sin identificar* (UIBs) y de las *bandas difusas interestelares* (DIBs). Esta emisión está presente de forma ubícuca en todas las direcciones del universo IR.

### 4.6.1 INTRODUCCIÓN

El estudio de las moléculas puras de carbono ha estado siempre muy ligado a su aparición en diferentes entornos astronómicos. La formación de estas especies en el laboratorio aparece de forma espontánea en plasmas producidos por el procesamiento energético de materiales ricos en carbono. En el espacio, estos fenómenos incluyen a las envolturas de estrellas carbonadas y las nubes interestelares iluminadas por un campo de radiación ultravioleta.

La gran flexibilidad de enlace del carbono y su capacidad única para formar enlaces sencillos, dobles y triples hace que sus compuestos aparezcan en una gran variedad de formas estructurales y de sistemas químicos. Hace tiempo que se propuso la existencia de otro *alótropo* (*sp*) estable del carbono<sup>1</sup>, formado por largas cadenas acetilénicas de átomos de carbonos con hibridación *sp* (poliinos). En los últimos 30 años se han descubierto numerosas cadenas lineales de carbono en nubes interestelares y circunestelares. Por ejemplo, se sabe que los cianopoliinos, HC<sub>2n+1</sub>N (*n*=1,5), son abundantes en nubes interestelares como TMC-1 y en envolturas de estrellas evolucionadas como IRC+10216 (Turner 1971; Morris *et al.* 1975, 1976; Broten *et al.* 1978; Bell *et al.* 1982, 1997). Además, la radioastronomía ha permitido detectar en las mismas fuentes las transiciones rotacionales de numerosas cadenas de carbono radiacales: C<sub>5</sub>H (Cernicharo *et al.* 1986); C<sub>6</sub>H (Guélin *et al.* 1987; Cernicharo *et al.* 1987); C<sub>8</sub>H (Cernicharo & Guélin 1996a); C<sub>7</sub>H (Guélin *et al.* 1997); H<sub>2</sub>C<sub>3</sub> y H<sub>2</sub>C<sub>4</sub> (Cernicharo *et al.* 1991a y b). La pequeña disminución en las abundancias relativas de las especies con mayor número de átomos (Cernicharo *et al.* 1987; Guélin *et al.* 1997) hace pensar que su producción es muy eficiente.

Las moléculas formadas sólo con átomos de carbono *sp* (cumulenos C<sub>n</sub>), aparecen en una gran cantidad de formas y geometrías, desde cadenas lineales hasta anillos y fullerenos. En las condiciones fisicoquímicas de los laboratorios terrestres son altamente reactivas y con vidas medias muy cortas, además de ser extremadamente difíciles de sintetizar y por tanto de estudiar. Actualmente se piensa que los agregados de carbono más pequeños que el C<sub>10</sub> poseen estructuras lineales de baja energía. La estructura de enlace más favorecida es la de tipo *cumulénico* (:C=C•••C=C:), con longitudes de enlace similares a lo largo de la cadena. En las cadenas con número par de átomos, existen configuraciones de tipo *acetilénico* (•C≡C-C•••C≡C•), donde la longitud de enlace va alternandose. La diferencia energética entre estas dos configuraciones disminuye con la longitud de la cadena (véase *p.ej.*, Parasuk & Almlöf 1991).

<sup>1</sup>En la teoría del *enlace de valencia*, un átomo de carbono experimenta una hibridación *sp*<sup>2</sup> para formar un enlace doble (grafito), una hibridación *sp*<sup>3</sup> para formar cuatro enlaces simples (diamante) y una hibridación *sp* para formar un triple enlace (cadenas acetilénicas) o dos enlaces dobles (cadenas cumulénicas).

El estado electrónico fundamental de las cadenas con un número impar de átomos es  $^1\Sigma_g^+$ , mientras que las cadenas con un número par es  $^3\Sigma_g^-$  (Pitzer & Clementi 1959). La característica espectroscópica más remarcable de las cadenas lineales de carbono<sup>2</sup> es la inusual amplitud de sus movimientos de *flexión* (*bendings*). Esto da lugar a que las frecuencias de vibración asociadas a este grado de libertad sean muy bajas ( $\leq 100 \text{ cm}^{-1}$ ), y aparecen en el IR-lejano. Como veremos enseguida, el caso más extremo es precisamente el carbono triatómico. Esta importante propiedad hace que se puedan detectar en el espacio moléculas simétricas sin momento dipolar eléctrico permanente y por tanto sin espectro rotacional en la región milimétrica.

De entre todas las cadenas de carbono, el C<sub>3</sub> ha tenido un importante papel en la astronomía desde el descubrimiento en 1882 de la banda electrónica  $A^1\Pi_u-X^1\Sigma_g^+$  en cometas, y su posterior caracterización en el laboratorio (Douglas 1951). Más recientemente ha sido observado en atmósferas de estrellas frías a longitudes de onda ópticas (Crampton *et al.* 1975) y en la envoltura de IRC+10216 mediante su modo de *tensión* (*stretching*)  $\nu_3$ , en el IR-medio (Hinkle *et al.* 1988). Pese a que se había sugerido que el carbono triatómico estaría presente en el esquema químico de formación de las bandas difusas interestelares (Douglas 1977; Clegg & Lambert 1982), nada se sabía sobre la existencia o abundancia del C<sub>3</sub> en el ISM. Un año después de nuestro descubrimiento en Sgr B2, también ha sido detectado en nubes del ISM difuso mediante su transición electrónica a  $\lambda \simeq 4052 \text{ \AA}$  (Maier *et al.* 2001). Mientras que la abundancia de las cadenas de carbono polares había sido inferida para el ISM y CSM, las especies pequeñas necesarias para su síntesis y producción seguían sin ser detectadas. En particular, la ausencia de momento dipolar permanente en algunas de ellas hacen imposible su detección mediante observaciones radioastronómicas. Sin embargo, se ha visto que estas especies poliatómicas tienen movimientos vibracionales de baja energía con transiciones que aparecen en el IR-lejano. El C<sub>3</sub> tiene su modo de *flexión*,  $\nu_2$ , a muy baja frecuencia,  $63.4 \text{ cm}^{-1}$  ( $\sim 158 \text{ }\mu\text{m}$ ; Schmuttenamer *et al.* 1990). La transición  $\nu_2 = 1 \rightarrow 0$  es la única forma de detectar esta molécula en el ISM ya que el flujo de radiación a la frecuencia del modo  $\nu_3$  de *tensión* en las nubes moleculares es demasiado para permitir la observación de C<sub>3</sub> en absorción.

#### 4.6.2 OBSERVACIONES Y REDUCCIÓN DE DATOS

La búsqueda de la emisión/absorción de C<sub>3</sub> se realizó dentro una propuesta específica de tiempo abierto para observaciones con ISO dentro del programa "Síntesis de hidrocarburos en el ISM y CSM". Para ello se ha utilizado el instrumento LWS/FP (Clegg *et al.* 1996) para observar varias nubes moleculares y envolturas circunestelares. Las fuentes seleccionadas cubren una gran variedad de condiciones físicas, lo que ofrece la posibilidad de detectar C<sub>3</sub> en regiones sometidas a choques (en emisión) o en fuentes con intenso continuo a  $\sim 158 \text{ }\mu\text{m}$  (en absorción/emisión). En esta sección se presentan los resultados obtenidos hacia Sgr B2 y en la SEC. 8.2 los obtenidos en la envoltura circunestelar de IRC+10216. Los datos LWS de Sgr B2 fueron obtenidos en las órbitas 322, 327, 469 y 476. El número de *scans* en cada espectro varía entre 12 y 30 dependiendo de la absorción esperada para cada transición. La calibración en flujo de los espectros FP era relativa al planeta Urano (Swinyard *et al.* 1996). Los datos fueron analizados con ISAP. La figura FIG. 4.15 muestra las líneas de C<sub>3</sub> resultantes. Estos datos proceden de la versión 7 del IDA. Se comprobó la calibración relativa del continuo FP con el *grating* y a los espectros se les sustrajo una línea de base polinómica de grado  $<3$ .

<sup>2</sup>En el CAP. 8 se da una descripción más completa de las características de las cadenas de carbono C<sub>n</sub>.

### 4.6.3 RESULTADOS

Las líneas rovibracionales del modo  $\nu_2$  detectadas en Sgr B2 (véase FIG. 4.15) aparecen a velocidades comprendidas entre 55 y 70  $\text{km s}^{-1}$ . Como se dijo en la sección anterior, si se tiene en cuenta el error absoluto en la calibración de la longitud de onda del FP ( $\pm 15 \text{ km s}^{-1}$ ), las diferencias en las velocidades LSR pueden ser atribuidas a efectos instrumentales. La velocidad media de las líneas observadas es  $65 \pm 5 \text{ km s}^{-1}$ , similar a la velocidad de la mayoría del gas en la región de Sgr B2(M). La línea R(2) muestra una absorción muy ancha, cubriendo  $\sim 200 \text{ km s}^{-1}$ . Al igual que ocurre con OH,  $\text{H}_2\text{O}$  y  $\text{H}_3\text{O}^+$ , esta absorción puede corresponder a las nubes moleculares del CG y/o a las nubes difusas en la línea de mirada. Aunque el rango de velocidad cubierto por la línea R(2) no asegura una buena determinación del nivel de continuo, las líneas R(4) y R(6) también muestran absorción a velocidades más negativas que las asociadas a Sgr B2. Las observaciones de van Orden (1995) con KAO asignaron tentativamente una absorción a  $63.7 \text{ km s}^{-1}$  con la línea R(2) de  $\text{C}_3$ . Sin embargo, no hicieron ningún análisis de sus datos. Las observaciones con ISO han permitido la detección de varias transiciones rovibracionales de esta especie, lo que constituye la detección definitiva de  $\text{C}_3$  en el ISM.

### 4.6.4 DISCUSIÓN

Desde la detección de  $\text{HC}_3\text{N}$  en el ISM (Turner 1971) y CSM (Morris *et al.* 1975), la síntesis de hidrocarburos complejos ha sido un campo de estudio principal en la química de especies orgánicas del ISM (*p.ej.*, Herbst & Leung 1989) y en la química de las envolturas de estrellas evolucionadas (*p.ej.*, Cherchneff & Glassgold 1993). En todos los modelos químicos, el  $\text{C}_3$  es fundamental para el crecimiento y producción de las cadenas de carbono. La determinación de su abundancia en el ISM y CSM es por lo tanto crucial para la comprensión de estos entornos astronómicos. Sin embargo, el problema de la excitación de los niveles energéticos del  $\text{C}_3$  es particularmente complicado debido a la baja energía de su nivel vibracional  $\nu_2$  (y sobretonos<sup>3</sup>). Pese a que su estado fundamental no tiene momento dipolar eléctrico permanente y sus niveles rotacionales pueden ser eficazmente poblados mediante colisiones, el momento dipolar de la transición  $(0,0,0) \rightarrow (0,1^1,0)$  es  $\simeq 0.2 - 0.4 \text{ D}$  (*p.ej.*, Schmuttenamer *et al.* 1990), haciendo que el modo de flexión  $\nu_2$  y sus sobretonos necesiten una densidad considerable y/o fotones IR para poblarse. Según sean las características de la región, colisiones y fotones IR competirán en el bombeo de los niveles rovibracionales de  $\text{C}_3$ . Para aquellas especies moleculares con estados vibracionales más energéticos se puede considerar que esos niveles se pueblan principalmente mediante fotones IR ya que las densidades necesarias para hacer efectivo el bombeo colisional son demasiado altas (González-Alfonso *et al.* 1998; González-Alfonso & Cernicharo 1999b). Para estimar la abundancia de  $\text{C}_3$  se han tomado los coeficientes colisionales de la molécula OCS (Green & Chapman 1978) para las transiciones dentro de un nivel vibracional y los mismos coeficientes divididos por un factor 10 para colisiones entre el estado fundamental y el modo de flexión. Puesto que la emisión del continuo en Sgr B2 a la longitud de onda del modo flexión ( $158 \mu\text{m}$ ) es muy fuerte y la opacidad del continuo es  $\simeq 1$ , la excitación de la molécula estará efectivamente dominada por fotones IR. En la SEC. 8.2 se verá que en envolturas circunestelares como IRC+10216, donde la emisión del continuo a  $\sim 5 \mu\text{m}$  (longitud de onda del modo de tensión) es muy fuerte, también hay que considerar otros mecanismos radiativos.

<sup>3</sup>Las transiciones *overtones* (sobretonos) de un modo vibracional  $\nu$  son aquellas que incluyendo al estado fundamental, cumplen  $\Delta\nu \geq 2$ . Aparecen a longitudes de onda menores que el modo  $\nu = 0 \rightarrow 1$ .

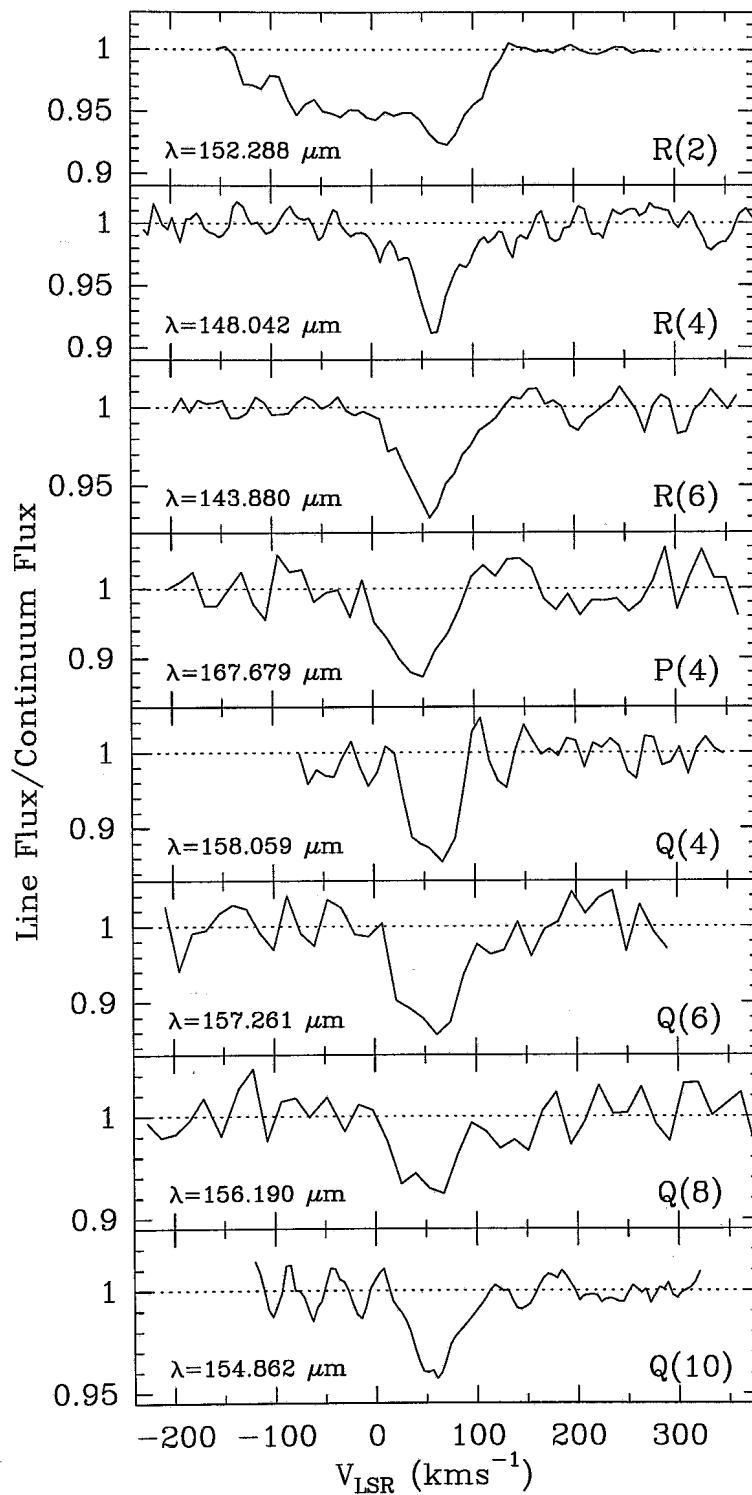


FIGURA 4.15: Observaciones LWS/FP de  $C_3$  en Sgr B2(M) y longitudes de onda en reposo. La escala de intensidades está normalizada al flujo del continuo. La abscisa corresponde a la velocidad LSR. El espectro con la línea Q(10) podría contener las transiciones  $J=5/2-3/2$  de SH a 154.864 y 154.915  $\mu\text{m}$ . Las dos líneas de SH tendrían intensidades similares y aparecerían separadas por 100  $\text{Km s}^{-1}$ . Las líneas de SH permanecen sin detectar, mientras que la línea Q(10) del carbono triatómico se detecta con una señal sobre ruido de 7.

### MODELO NO-LOCAL: LA ABUNDANCIA DE $C_3$

Como se observa en la FIG. 4.15, las líneas de  $C_3$  en Sgr B2 son intensas y sugieren una gran abundancia para esta especie. El modelo utilizado para el carbono triatómico y los parámetros físicos adoptados es similar al que se ha utilizado para la absorción de  $H_2O$  y  $OH$  (véase 2.4.2). El modelo es simple y se utiliza para determinar las condiciones generales bajo las cuales las líneas de  $C_3$  aparecen en absorción y con qué profundidad óptica. Se asume una nube esférica y uniforme con los parámetros físicos de Sgr B2: densidad de columna total de  $H_2$  igual a  $2 \times 10^{23} \text{ cm}^{-2}$ , cociente másico gas/polvo 100, radio de los granos de polvo  $0.1 \mu\text{m}$ , velocidad de turbulencia  $10 \text{ km s}^{-1}$  y temperatura del polvo de 30 K. La densidad de  $H_2$ , la temperatura cinética del gas y la abundancia de  $C_3$  son los parámetros libres del modelo. El modelo calcula la población en equilibrio estadístico de los niveles rovibracionales teniendo en cuenta la excitación de la molécula por los fotones procedentes de los granos de polvo. Las opacidades del continuo son 3.5 y 1.9 a 100 y  $180 \mu\text{m}$  respectivamente. En las regiones más internas de la nube, la excitación del  $C_3$  está dominada por fotones IR. La opacidad del polvo a  $150 \mu\text{m}$  es  $\sim 3$  y son muy pocos los fotones que consiguen escapar de las regiones más densas de la nube. Por otro lado, el flujo de Sgr B2 a las longitudes de onda de los *sobretonos* del modo *flexión* decrece considerablemente. La excitación por absorción de fotones a las frecuencias de las transiciones  $\Delta\nu = 2, 3, \dots$  es menos importante. En las regiones externas de la nube, las colisiones y los fotones procedentes de las zonas internas de la nube compiten en la población de los niveles rovibracionales de  $C_3$ . Con los coeficientes colisionales de OCS adoptados, las temperaturas de excitación en las regiones externas son  $\simeq 10\text{--}15 \text{ K}$  y en las regiones internas  $\simeq 20\text{--}25 \text{ K}$ . El mejor ajuste de las observaciones se obtiene para una abundancia de  $C_3$  de  $3 \times 10^{-8}$ , una densidad  $n(H_2) = 10^5 \text{ cm}^{-3}$  y una temperatura  $T_k = 20 \text{ K}$ , con un factor 2 de error dadas las suposiciones hechas en el modelo. Las absorciones teóricas (FIG. 4.16) varían entre un 15% y un 30% para las líneas pertenecientes a las bandas  $-P$ ,  $-Q$ , y  $-R$  con niveles rotacionales hasta  $J=12$ .

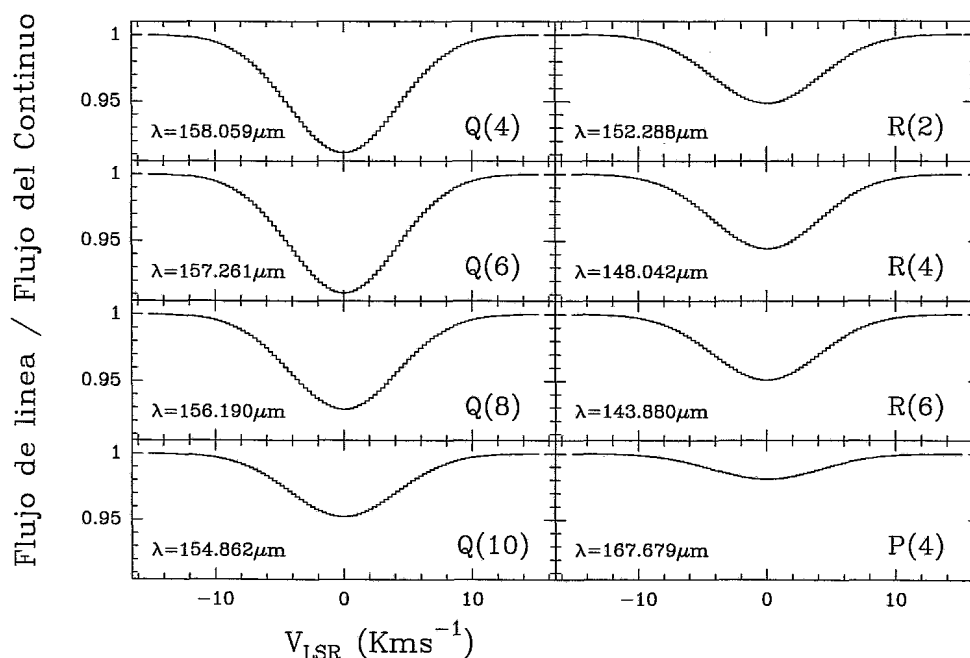


FIGURA 4.16: Absorciones teóricas obtenidas del modelo no-local de  $C_3$  para Sgr B2. En esta figura las líneas no están convolucionadas con el perfil instrumental del Fabry-Perot.



Como se ha dicho, la línea R(2) y otras con número cuántico  $J$  bajo presentan absorción a velocidades diferentes de las de Sgr B2. Si al modelo anterior se le añade un capa absorbente situada entre el telescopio y Sgr B2 con  $N(H_2) = 10^{22} \text{ cm}^{-2}$  y  $v_{tur} = 40 \text{ km s}^{-1}$ , se encuentra que la densidad de columna de  $C_3$  en las nubes difusas en la línea de mirada es menor que en Sgr B2. La abundancia de  $C_3$  en estas nubes disminuye a  $10^{-9}$ .

Los modelos químicos predicen que la abundancia de  $C_3$  en el ISM se sitúa entre  $10^{-8}$  (para las primeras etapas evolutivas de la nube) y  $10^{-10}$  (alcanzado el estado estacionario) (Herbst & Leung 1989). Nuestros resultados favorecen la formación de  $C_3$  en las primeras etapas evolutivas de las nubes moleculares, lo cual es consistente con la idea de que este tipo de moléculas pueden ser las progenitoras de agregados más complejos. Como complemento al trabajo en Sgr B2 y buscando una generalización de estas ideas, se ha buscado esta especie molecular en el espectro IR-lejano del resto de nubes moleculares de nuestro proyecto. Hasta la fecha no se ha detectado el carbono triatómico en ninguna de ellas. Por tanto, no se pueden sacar conclusiones en cuanto a las diferencias químicas que conducen a la producción de grandes cantidades de carbono triatómico en la región de Sgr B2.

#### CONTRIBUCIÓN DE LAS MOLÉCULAS POLIATÓMICAS AL ESPECTRO EN EL IR-LEJANO DE LAS NUBES DEL ISM Y CSM

El número de moléculas ligeras abundantes y con momento dipolar significativo como para producir emisión/absorción intensa en el IR-lejano es bastante reducido. Las especies más importantes son: CO,  $H_2O$ ,  $NH_3$ , OH, HCN,  $NH_2$ , NH, CH,  $CH^+$ ,  $CH_2$ , etc.). Dependiendo de la fuente en particular y de sus condiciones físicas, se esperaría un espectro en el IR-lejano prácticamente sin líneas espectrales en comparación con la riqueza y densidad de líneas en la región milimétrica y submilimétrica del espectro. Sólo las especies ligeras pueden tener transiciones rotacionales de baja energía en el IR-lejano puesto que las transiciones rotacionales de las especies poliatómicas involucran números cuánticos altos y por tanto, energías muy elevadas.

Sin embargo, las especies poliatómicas como  $C_3$ ,  $C_4$ ,  $C_5$ ,  $C_3H$ ,  $C_4H$ ,  $C_4H_2$  o  $C_6H_2$  poseen movimientos vibracionales (*bendings*) de baja energía. Las transiciones rovibracionales asociadas a estos movimientos pueden contribuir también al espectro IR-lejano de las fuentes del ISM y CSM. Este es el caso de  $C_3$ . Obviamente, las especies de este tipo con movimientos de flexión más amplios, *i.e.* mayor fuerza de oscilador para la transición vibracional, producirán líneas más intensas en emisión/absorción.

La detección del modo de *flexión* del carbono triatómico abre definitivamente la posibilidad de detectar moléculas simétricas sin momento dipolar eléctrico permanente (sin espectro rotacional) en el IR-lejano. Aunque estas mismas especies podrían también ser observadas en el IR-medio y -cercano a través de sus movimientos de *tensión*, no todas las nubes moleculares pueden emitir de forma intensa en esos rangos espectrales.

La presente detección de  $C_3$  y las de  $C_5$  (Bernath, Hinkle & Keady 1989),  $C_4H_2$  y  $C_6H_2$  (Cernicharo *et al.* 2001a) indican claramente que las moléculas poliatómicas simétricas se forman eficientemente tanto en el ISM como en el CSM. Finalmente, nótese que al espectro IR-lejano también pueden contribuir las transiciones de *tipo-b* de especies poliatómicas ligeramente asimétricas como HNC,  $HOCO^+$ , HCO, HNO, etc. La detección de  $C_3$  en Sgr B2 indica que los futuros telescopios podrán seguir profundizando en la complejidad química del ISM y CSM a través de las observaciones de los movimientos de flexión de otras moléculas poliatómicas.

## 4.7 RESUMEN

En este capítulo se ha presentado el espectro ISO/LWS Fabry-Perot de Sgr B2(M) con una resolución en velocidades de  $\sim 35 \text{ km s}^{-1}$ . El número de especies observadas es de  $\sim 15$ , algunas de ellas detectadas por primera vez en el ISM denso. En particular se ha analizado con detalle la absorción/emisión producida por  $\text{H}_3\text{O}^+$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{OH}$  y  $\text{C}_3$ . Los resultados más importantes del capítulo son:

- **Análisis de la emisión del polvo en el rango continuo entre 43 y 197  $\mu\text{m}$ :**

Sgr B2(M) constituye una intensísima fuente de continuo en el IR-lejano ( $\sim 2.4 \times 10^6 L_\odot$ ). Los ajustes de la emisión del polvo han mostrado que la opacidad del continuo es muy elevada ( $\tau_{100} = 3.8 \pm 0.4$ ). Los mejores ajustes se obtienen para una temperatura del polvo de  $31 \pm 1 \text{ K}$ . El mejor exponente en la emisividad de los granos de polvo es  $\beta \sim 1$ , compatible con la ausencia de mantos de hielo.

- **Primera detección de  $\text{H}_3\text{O}^+$  en el IR-lejano:**

Las tres líneas observadas provienen del estado fundamental del nivel de inversión  $\nu_2$  ( $0^+ \rightarrow 0^-$ ) a  $55.3 \text{ cm}^{-1}$ . Todas las líneas se han observado en absorción, produciéndose en dos regiones diferentes y que no están conectadas físicamente. Por un lado la extensa envoltura de Sgr B2 y por otro, las nubes difusas en la línea de mirada hacia el CG. Se han derivado abundancias similares,  $\chi(\text{H}_3\text{O}^+) \sim 10^{-9}$ , para las dos regiones. Puesto que la recombinación disociativa de  $\text{H}_3\text{O}^+$  conduce a la formación eficiente de  $\text{H}_2\text{O}$  y  $\text{OH}$ , estas dos especies deberán ser particularmente abundantes, especialmente si además contribuyen otros procesos químicos asociados la fotodisociación de especies moleculares o a los choques de baja velocidad predichos en la literatura. También se ha estudiado la contribución de la línea  $1_1^- \leftarrow 1_1^+$  a  $\sim 181 \mu\text{m}$  a la línea  $2_{12}-1_{01}$  de  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  utilizada como diagnóstico de la abundancia de  $\text{H}_2\text{O}$ . Se ha estimado que la contaminación de  $\text{H}_3\text{O}^+$  es del  $\sim 40\%$ .

- **Detección de la absorción térmica del vapor de agua ( $\text{H}_2^{16}\text{O}$  y  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ ) hacia Sgr B2(M) y el primer cartografiado de la emisión maser a 183 GHz:**

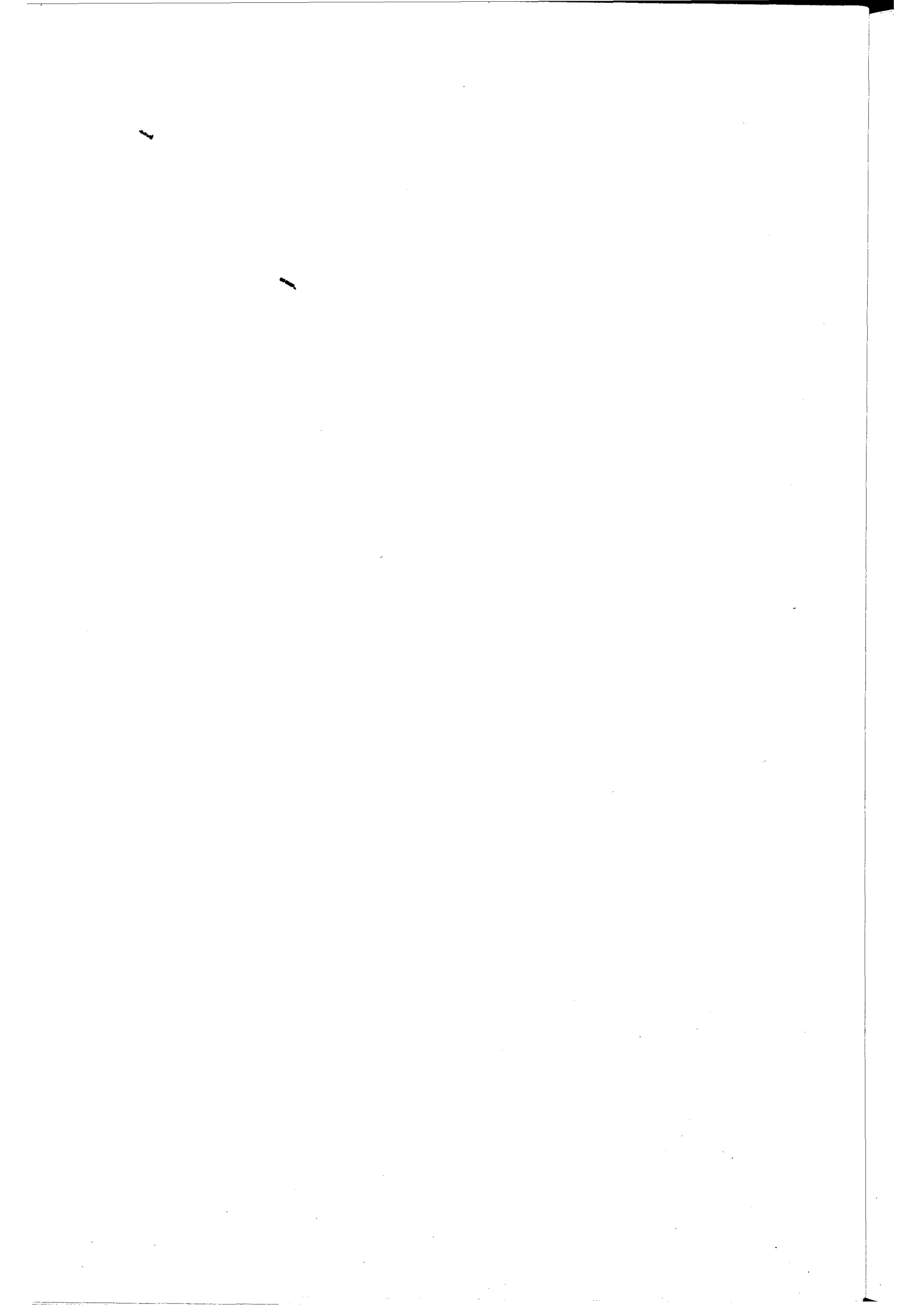
Las observaciones se han modelado con un código de transferencia de radiación no-local que permite determinar la densidad de columna del agua. A pesar de las 14 líneas rotacionales detectadas, la elevada opacidad de todas las transiciones ( $\sim 10^3$ ) hace que los modelos sean poco sensibles a las condiciones físicas de la región absorbente. Estos parámetros podrán fijarse con mayor exactitud con la futura detección de líneas rotacionales de  $\text{H}_2\text{O}$  más débiles en el IR-lejano y submilimétrico. Suponiendo que la absorción de  $\text{H}_3\text{O}^+$  y  $\text{H}_2\text{O}$  surgen en la misma región, se ha podido estimar un cociente de densidades de columna  $[\text{H}_2\text{O}]/[\text{H}_3\text{O}^+] \sim 200$ , inferior a las predicciones de los modelos de equilibrio químico. Se ha sugerido que la presencia de un campo de radiación UV en las regiones más externas de la nube podría provocar la fotodisociación del vapor de agua, disminuyendo la densidad de columna esperada de  $\text{H}_2\text{O}$  en función de la encontrada de  $\text{H}_3\text{O}^+$  y aumentando la de  $\text{OH}$ , producto resultante de la fotodisociación del vapor de agua. Uno de los diagnósticos para confirmar este escenario, el cociente de abundancias  $[\text{OH}]/[\text{H}_2\text{O}]$ , ha podido ser determinado de forma precisa gracias a las observaciones simultáneas de  $\text{OH}$  con ISO/LWS.

- **Detección de varios dobletes- $\Lambda$  de  $^{16}\text{OH}$  y  $^{18}\text{OH}$  hacia Sgr B2:**

Las líneas rotacionales de la escalera  $^2\Pi_{1/2}$  a  $\sim 98$  y  $\sim 163 \mu\text{m}$  aparecen en emisión, mientras que las *cross ladder* a  $\sim 79$ ,  $\sim 53$  y  $\sim 34 \mu\text{m}$ , y las líneas de la escalera  $^2\Pi_{3/2}$  a  $\sim 119$  y  $\sim 84 \mu\text{m}$  aparecen en absorción. También se ha detectado el doblete fundamental de  $^{18}\text{OH}$  a  $\sim 120 \mu\text{m}$ . Excepto el doblete a  $\sim 98 \mu\text{m}$ , los demás están resueltos. Aquellos que conectan con el nivel fundamental  $^2\Pi_{3/2} J=3/2$  muestran además de la absorción asociada a Sgr B2, varias componentes a velocidad negativa relacionadas con las nubes difusas situadas en la línea de mirada. A la sensibilidad de las observaciones ISO, no se han detectado asimetrías en la intensidad de las componentes de los dobletes- $\Lambda$ . Estas observaciones se han modelado con un código de transferencia de radiación no-local que ha permitido encontrar que la absorción/emisión de OH procede de una envoltura caliente ( $T_k \simeq 300 \text{ K}$ ) no resuelta por el haz de  $80''$  del LWS. La densidad del gas ( $\leq 10^4 \text{ cm}^{-2}$ ) es menor a la encontrada en las regiones interiores de Sgr B2. Se ha explicado que la elevada abundancia de OH encontrada,  $\chi(\text{OH}) = 2-5 \times 10^{-6}$ , puede ser consecuencia efectivamente de la presencia de un campo de radiación UV que ilumina las capas externas de Sgr B2; fotodisocia el vapor de agua y forma PDRs en la envoltura.

- **Primera detección del carbono triatómico ( $\text{C}_3$ ) en el ISM:**

En particular, se han detectado varias líneas rovibracionales del modo de *flexión*  $\nu_2$  hacia Sgr B2(M). Mediante un modelo simple de excitación de  $\text{C}_3$  se ha estimado una abundancia de  $\chi(\text{C}_3) \simeq 3 \times 10^{-8}$  para Sgr B2, lo cual es consistente con la formación de  $\text{C}_3$  en las primeras etapas evolutivas de la nube molecular. En general, las moléculas poliatómicas tienen una contribución muy débil a la emisión/absorción en el IR-lejano a través de su espectro rotacional. Sin embargo, se ha sugerido que pueden ser las portadoras dominantes a través de sus movimientos vibracionales de baja energía. La detección de  $\text{C}_3$  en uno de estos modos demuestra que el IR-lejano permite detectar especies moleculares simétricas y sin espectro rotacional susceptible de ser observado desde radiotelescopios terrestres.



## Capítulo 5

# La región extensa de Sgr B2

En este capítulo se presentan observaciones ISO a gran escala  $9' \times 27'$  ( $25 \text{ pc} \times 70 \text{ pc}$ ) de la región de Sgr B2 en el IR-lejano realizadas con el instrumento LWS. Estas observaciones son de menor resolución espectral ( $\sim 1000 \text{ km s}^{-1}$ ) que las presentadas en el capítulo anterior en la posición central de la región, Sgr B2(M). Sin embargo, se ha podido estudiar simultáneamente la distribución en temperaturas y la extinción del polvo situado en las regiones más externas de la nube y confirmar que la presencia de especies moleculares como el vapor de agua, OH o CH es extensa en las nubes moleculares. Además, la emisión en líneas de estructura fina de especies como  $\text{O}^{++}$ ,  $\text{N}^{++}$  y  $\text{N}^+$  ha desvelado la presencia de una componente muy extensa de gas ionizado que alcanza posiciones muy alejadas ( $\sim 35 \text{ pc}$ ) de las regiones de formación estelar conocidas en Sgr B2(M). La presencia de esta componente pone de manifiesto la importancia del campo de radiación UV en Sgr B2. Los efectos de la radiación en las nubes de CG y en Sgr B2 en particular, han sido poco tenidos en cuenta en la literatura. En este capítulo se analiza su contribución a la formación de *regiones de fotodisociación* (PDRs) y se estudian las condiciones físicas de estas regiones a través de su emisión en  $\text{C}^+$  y  $\text{O}^0$ . Finalmente, se estudian los efectos del campo de radiación en relación con la química de las especies oxigenadas ( $\text{H}_2\text{O}$ , OH y  $\text{O}^0$ ) y nitrogenadas ( $\text{NH}_3$ ,  $\text{NH}_2$  y NH). En particular se presenta la primera detección de NH en el ISM denso y la primera detección de  $\text{NH}_2$  en el IR-lejano.

### 5.1 INTRODUCCIÓN

El complejo molecular Sagitario B (Sgr B) está localizado en los 500 pc interiores de la galaxia conocidos usualmente como la Zona Molecular Central (Morris & Serabyn 1996) a longitudes galácticas  $l \simeq 0.6^\circ \pm 0.2^\circ$ . Sgr B contiene en su interior a las conocidas radio fuentes Sgr B2, Sgr B1 y G0.6 – 0.0 (véase la FIG. 5.1b). Sgr B1 se sitúa en el sur del complejo y al contrario que Sgr B2 está dominado por radio fuentes extensas (Mehring *et al.* 1992). La región G0.6 – 0.0 está localizada a medio camino entre Sgr B2 y B1, siendo la velocidad del gas ionizado también intermedia entre la de Sgr B2 y B1. Esto sugiere que estas tres regiones están físicamente asociadas. Sgr B2 por su parte, es la emisión más intensa (Pierce-Price *et al.* 2000) y la nube molecular más masiva del CG (Lis & Goldsmith 1990). En lo que sigue, se asume que el complejo Sgr B está situado a una distancia de 8.5 kpc (Kerr & Lynden-Bell 1986).

En la SEC. 3.2 se han descrito en profundidad las condiciones físicas de la región. Aquí sólo se recuerdan las más significativas para la comprensión del resto capítulo.

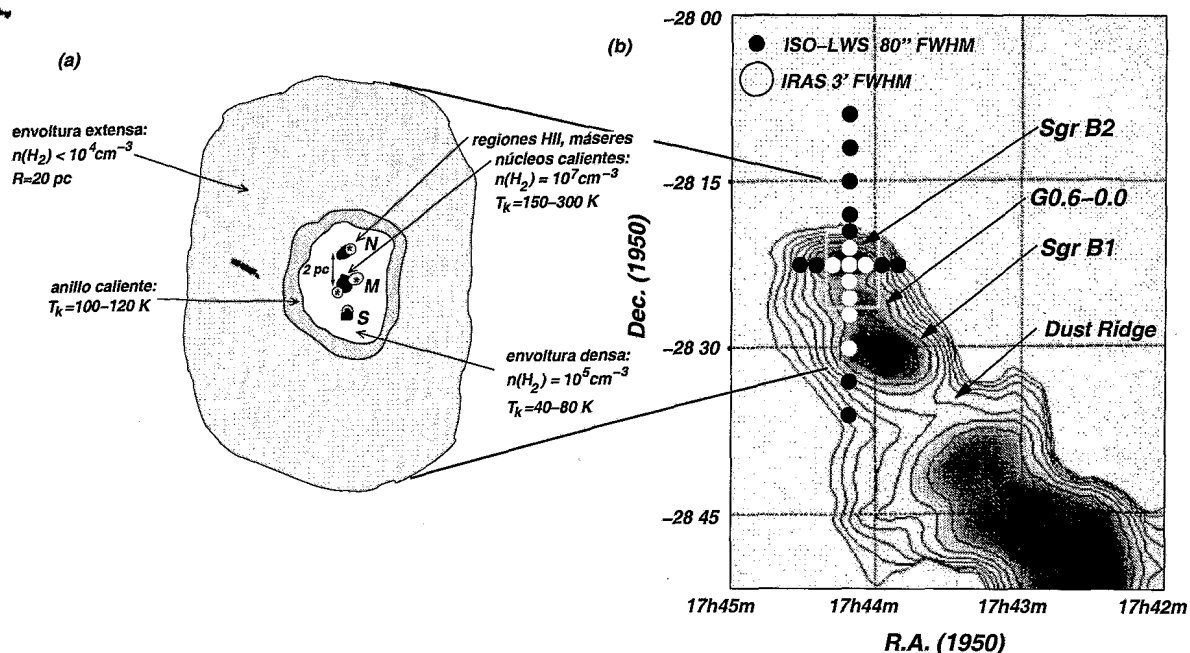


FIGURA 5.1: (a): Esquema resumen de las diferentes estructuras y componentes en Sgr B2. Los núcleos calientes y densos aparecen sombreados en negro. Las regiones HII son las estructuras que rodean a las estrellas. Las dimensiones no están a escala. (b): Mapa a  $60 \mu\text{m}$  tomado con IRAS del complejo Sgr B (Gordon et al. 1993) y posiciones observadas con ISO-LWS.

La FIG. 5.1a resume las principales componentes estructurales de Sgr B2. La región central está dominada por las tres condensaciones de polvo conocidas como Sgr B2(N,M,S), las cuales se distribuyen a lo largo de una línea imaginaria Norte-Sur de  $2'$  ( $\sim 5$  pc). Estas regiones de formación estelar están rodeadas por una nube de densidad moderada,  $n(H_2) \sim 10^{5-6} \text{ cm}^{-3}$ , con un tamaño de  $\sim 10$  pc (Lis & Goldsmith 1991; Hüttemeister et al. 1993a). La temperatura cinética en la nube de densidad moderada descende con la distancia al centro de la región desde 80 a 40 K excepto en una estructura anular de gas más caliente ( $T_k = 100-120$  K) con un radio de  $\sim 4$  pc (de Vicente et al. 1997). Estas regiones internas están rodeadas a su vez por una envoltura extensa ( $\sim 15'$ ) de menor densidad ( $n_{H_2} \leq 10^4 \text{ cm}^{-3}$ ), con temperaturas cinéticas  $\geq 100$  K (Hüttemeister et al. 1995) y de polvo  $\simeq 19$  K (Gordon et al. 1993).

El origen de la riqueza química en la envoltura de Sgr B2 (muchas veces el único lugar de la galaxia para la detección de ciertas moléculas) y los mecanismos de calentamiento del gas dominantes, siguen sin estar establecidos. Los choques de baja velocidad no disociativos han sido tradicionalmente propuestos para explicar las diferencias observadas entre las temperaturas del gas y del polvo, así como las altas densidades de columna de algunas especies moleculares que, como el  $\text{NH}_3$  o el  $\text{SiO}$ , están directamente relacionadas con la formación en la superficie de los granos de polvo (Martín-Pintado et al. 1997; Flower et al. 1995). El origen de los choques en Sgr B2 ha sido asociado tanto a fenómenos a gran escala como la colisión entre dos nubes moleculares (Hasegawa et al. 1994), como a fenómenos a pequeña escala como las burbujas en expansión producidas por vientos estelares procedentes de estrellas evolucionadas y localizadas en la propia envoltura (p.ej., Martín-Pintado et al. 1999).

Por otro lado, los efectos a gran escala de la radiación en la envoltura de Sgr B2 han sido tradicionalmente desestimados debido a las diferencias entre las temperaturas del gas y del polvo, la inusual química de la región y la ausencia de radio continuo térmico y gas ionizado fuera de las regiones HII del centro de la nube. En las próximas secciones se presentan nuevas observaciones de Sgr B2 con ISO que muestran la presencia de una componente extensa de gas ionizado detectada por la emisión de líneas de estructura fina de algunos iones. La presencia de emisión en rayos-X y de un campo de radiación UV que ilumina grandes regiones provocará la formación de PDRs y XDRs en la frontera entre el gas ionizado y el gas molecular más protegido de la radiación. La enorme complejidad de Sgr B2 probablemente permita la coexistencia de diferentes escenarios y mecanismos de excitación en la región.

En este capítulo se estudian las propiedades a gran escala de la región de Sgr B2 y los efectos de la radiación UV analizando varios espectros en el IR-lejano (de 43 a 197  $\mu\text{m}$ ). En la SEC. 5.2 se presentan las observaciones ISO/LWS y se discuten las características fundamentales del proceso de reducción de datos. Los espectros resultantes se presentan y analizan en las siguientes secciones: la emisión extensa del polvo (SEC. 5.3), la emisión de líneas de estructura fina (SEC. 5.4), y el gas molecular (SEC. 5.5). Para este estudio se han empleado diversas técnicas: ajustes de cuerpos grises, modelos de fotoionización, códigos de transferencia de radiación en líneas moleculares y comparación con modelos teóricos de PDRs. Finalmente, en la SEC. 5.7 se presenta una visión global y un resumen del capítulo.

## 5.2 OBSERVACIONES

Como se ha venido comprobando en esta tesis, el rango espectral del IR-lejano cubre varios e interesantes fenómenos que son difíciles de observar desde telescopios terrestres. Entre estos fenómenos se incluye la emisión de líneas de estructura fina de átomos e iones, las líneas rotacionales fundamentales/de  $J$ -alto de especies moleculares ligeras/pesadas, los modos de *flexión* de baja energía de las cadenas lineales de carbono y el máximo de la emisión del continuo para la mayoría de las regiones de formación estelar. Con esto en mente, se propuso la utilización del instrumento LWS (Clegg *et al.* 1996) a bordo de ISO (Kessler *et al.* 1996) para estudiar la distribución a gran escala del polvo y del gas ionizado y neutro, así como el contenido molecular en la región de Sgr B2.

En este capítulo se muestran observaciones procedentes de nuestras propuestas de tiempo abierto de observación con ISO/LWS en diferentes posiciones del complejo Sgr B. Los primeros resultados fueron expuestos por Cernicharo *et al.* 1997a. Además, se presentan otras observaciones LWS procedentes del archivo público IDA<sup>1</sup>. Las observaciones principales son un mapa  $9' \times 27'$  en forma de cruz de 19 posiciones individuales (FIG. 5.1b) tomado en el modo de observación LWS AOT L01. El mapa está centrado cerca de la posición de Sgr B2(M) en  $\alpha = 17^{\text{h}}44^{\text{m}}10.61^{\text{s}}$ ,  $\delta = -28^{\circ}22'30.0''$  [J1950]. Los desplazamientos entre posiciones consecutivas son de  $90''$ , excepto en las posiciones al Norte y Sur con  $|\Delta\delta| \geq 450''$  para los que se escogió un espaciado de  $180''$ . Como se ha visto en la SEC. 4.1, la posición central del mapa ha sido muy estudiada con la mayor resolución espectral proporcionada por el FP.

<sup>1</sup> vease <http://www.iso.vilspa.esa.es/ida>



### 5.2.1 OBSERVACIONES LWS AOT L01

El mapa en forma de cruz fue realizado durante Agosto de 1996 y Febrero de 1997 (TDTs 28702130, 28702131, 46900233 y 46900234), utilizando el modo LWS AOT L01 que proporciona una resolución espectral de  $0.29 \mu\text{m}$  para el rango  $43\text{--}93 \mu\text{m}$  (detectores SW1 a SW5) y de  $0.6 \mu\text{m}$  para el rango  $80\text{--}197 \mu\text{m}$  (detectores LW1 a LW5). Los 10 detectores empleados tienen haces ( $\Omega_{LWS}$ ) diferentes, pero todos ellos alrededor de  $80''$ . La incertidumbre en la calibración del flujo oscila entre el 10 y el 50 % dependiendo de la geometría de la fuente, el flujo de la fuente en el IR-lejano y el detector en particular (Gry *et al.* 2002). Analizando a las longitudes de onda donde se solapan dos detectores diferentes, se concluye que el flujo medido por dos detectores a una misma longitud de onda no se diferencia en más del 10%. Para obtener un espectro suave y alineado se han introducido factores de desplazamiento menores que el 10% del flujo total del detector (vease la cruz en la FIG. 5.2). Tan solo el detector LW02 mostraba intensidades relativas al flujo del detector previo y posterior superiores al  $\sim 20\%$  y fue multiplicado por un factor de 0.8. Los datos de mayor longitud de onda fueron corregidos del patrón de interferencia observado sistemáticamente en los espectros AOT L01 de fuentes extensas o de fuentes puntuales desplazadas del eje óptico (Swinyard *et al.* 1996, FIG. 5.2b).

Dependiendo de la posición observada, el espectro en el IR-lejano muestra líneas rotacionales de  $\text{H}_2\text{O}$ , OH y CH y líneas de estructura fina atómicas. Se han detectado claramente en todas las posiciones las líneas [OI]63 y  $145 \mu\text{m}$ , y [CII]158  $\mu\text{m}$ . Además, se ha detectado la emisión procedente de iones de mayor potencial de excitación<sup>2</sup> en varias posiciones a través de las líneas [NII]122, [NIII]57, [OIII]52 y  $88 \mu\text{m}$ . Las líneas OH ( $\sim 79 \mu\text{m}$ ), [OI]63, [NIII]57 y [OIII]88  $\mu\text{m}$  aparecen en dos detectores diferentes. Puesto que los flujos coincidían en un  $\sim 15\%$ , se han promediado las dos detecciones. Los flujos de cada línea fueron obtenidos ajustando gaussianas a cada línea después de haber sustraído una línea de base polinómica en cada detector. La TABLA 5.1 muestra los flujos de las líneas de estructura fina.

### 5.2.2 OBSERVACIONES LWS AOT L04

El instrumento LWS/FP ha sido utilizado también para investigar las líneas de estructura fina y algunas líneas moleculares que no fueron discutidas en el capítulo anterior a mayor resolución espectral ( $\sim 35 \text{ km s}^{-1}$ ). Los TDTs de las observaciones de las líneas de estructura fina son: 32201429, 46201118, 46400416, 47600809, 50601112 y 50700707. Las líneas detectadas de  $\text{NH}_2$  proceden de los TDTs 50601013 y 50800515, mientras que las observaciones de NH proceden de los TDTs 47600907, 50600405 y 83600605. Como se ha visto en el CAP. 4, el espectro LWS/FP de Sgr B2(M) incluye las líneas [OI], [CII] y [OIII] (vease la FIG. 5.3a y b) también detectadas en las observaciones *grating* de baja resolución. En el caso de las líneas [OIII]52 y  $88 \mu\text{m}$ , la clara identificación LWS/FP confirma la dudosa detección realizada con el *grating*, y muestra la importancia de las observaciones de elevada resolución espectral. Finalmente, se presenta un mapa en declinación  $\Delta\delta = \pm 270''$  de algunas líneas moleculares (TDT 32201429). La FIG. 5.10a muestra el resultado del mapa para la línea a  $119.442 \mu\text{m}$  de  $^{16}\text{OH}$ . La riqueza y densidad de líneas del espectro LWS/FP de Sgr B2(M) presentado en la SEC. 4.1 (FIG. 4.2), sugiere que el espectro en el IR-lejano de las otras 18 posiciones de la región de Sgr B2 puede ser mucho más rico de los observado a la resolución del LWS/*grating*.

<sup>2</sup>Potencial de excitación de las especies observadas (en eV): 11.26[CII], 14.53[NII], 29.60[NIII], 35.12[OIII]



TABLA 5.1: *Flujos de las líneas de estructura fina en la región de Sgr B2 obtenidos ajustando gaussianas a los espectros LWS/grating. Los flujos están en unidades de  $10^{-19} \text{ W cm}^{-2}$ . Los números entre paréntesis son los errores estadísticos de cada ajuste. Las posiciones (desplazamientos en segundos de arco) se refieren a la posición del centro del mapa, Sgr B2(M).*

$\lambda(\mu\text{m})$	[CII]	[OI]	[NII]	[OIII]	[OI]	[NIII]	[OIII]
posición	157.741	145.525	121.898	88.356	63.184	57.317	51.815
(0,810)	68.0(2.3)	5.1(0.1)	5.6(0.5)	2.8(1.2)	20.1(1.2)	<4	<7
(0,630)	69.4(2.5)	4.1(0.4)	4.8(1.1)	4.0(1.5)	21.3(1)	<3	7.8(4.1)
(0,450)	86.0(4.1)	6.4(0.6)	10.9(1.7)	5.9(0.2)	31.2(1.5)	<1	8.6(2.2)
(0,270)	79.0(5.8)	8.4(3.3)	3.0(1.0)	4.1(0.9)	33.0(1.2)	<4	<5
(0,180)	62.6(5.9)	10.3(6.0)	3.4(0.5)	4.3(1.0)	20.6(1.5)	<4	<6
(0,90)	— <sup>a</sup>	42.0(1.3)	<35	28.4(4.2)	-14.9(2.9)	<11	8.2(3.1)
(0,0)	— <sup>a</sup>	73.3(8.2)	<44	41.5(17.2)	-137.2(18.1)	<17	21.9(6.2)
(0,-90)	149.0(10.5)	39.9(1.0)	18.5(4.6)	71.5(8.3)	25.6(2.6)	8.1(2.4)	26.3(4.7)
(0,-180)	237.2(8.8)	29.7(3.3)	41.6(6.0)	98.0(4.7)	83.7(3.6)	21.7(2.9)	60.0(7.1)
(0,-270)	235.3(6.7)	24.7(2.1)	33.9(3.6)	67.4(6.7)	73.2(2.7)	25.5(2.9)	25.9(3.4)
(0,-450)	210.7(4.0)	14.9(1.4)	39.6(4.6)	19.9(3.2)	63.6(1.4)	11.1(3.5)	22.8(7.9)
(0,-630)	146.6(4.5)	11.1(0.5)	17.6(3.6)	10.5(1.5)	31.0(3.8)	5.3(3.6)	20.6(10.6)
(0,-810)	113.8(2.0)	6.8(0.5)	16.6(1.0)	15.0(1.4)	23.3(1.7)	3.3(1.2)	9.2(1.1)
(270,0)	104.3(6.0)	13.6(1.7)	9.1(1.6)	6.3(1.5)	38.9(2.6)	<4	<1
(180,0)	144.7(5.6)	11.1(1.1)	19.0(2.0)	18.1(1.6)	46.9(2.6)	<7	18.1(2.9)
(90,0)	174.2(7.8)	32.5(2.1)	35.0(2.8)	67.9(4.5)	45.9(2.0)	28.1(3.0)	26.1(4.0)
(-90,0)	60.6(8.7)	21.4(2.4)	<8	13.4(3.4)	12.6(1.9)	<3	5.1(8.5)
(-180,0)	108.0(4.9)	10.0(1.1)	<7	11.0(7.0)	23.3(1.8)	<3	3.9(1.9)
(-270,0)	94.8(5.0)	9.8(0.6)	<6	9.7(1.3)	17.8(1.3)	<4	3.4(0.3)

<sup>a</sup> La línea [CII]158  $\mu\text{m}$  no se detecta en Sgr B2(M,N) debido a la baja resolución del LWS/grating. Los espectros LWS/FP si muestran el perfil resuelto de la línea (vease FIG. 5.3b). Además de la emisión asociada a Sgr B2(M), el perfil muestra una absorción producida por el el gas difuso situado en la línea de mirada. Esta absorción hace que el flujo esperado para la línea no resuelta se reduzca hasta el nivel de ruido de las observaciones LWS/grating. Por tanto, la no detección en el espectro grating es compatible con la detección en el espectro FP.

### 5.2.3 REDUCCIÓN DE DATOS

Todos las observaciones AOT L04 han sido procesadas y comparadas desde la versión OLP 6.0 hasta la verisión OLP 10.1. La única diferencia reseñable es que en las versiones más recientes del archivo de datos, las líneas producen menor absorción en un factor < 10% debido a pequeñas diferencias entre el nivel de continuo medido al pasar de una OLP a otra. Todos los productos AOT L01, L03 y L04 presentados en este capítulo han sido analizados interactivamente con ISAP. Las rutinas típicas del proceso de reducción incluyen la eliminación manual de parásitos debidos a rayos cósmicos, el suavizado y promediado de los *scans* individuales, la corrección del patrón de interferencia en los espectros AOT L01, la sustracción de una línea de base polinómica y el ajuste de gaussianas para extraer el flujo y la anchura de cada línea.

### 5.3 LA EMISIÓN EXTENSA DEL POLVO

Todas las posiciones alrededor de Sgr B2(M) [(0'',0'')] presentan su máximo de emisión del continuo entre 90 y 100  $\mu\text{m}$  (FIG. 5.2), lo que indica que la mayoría del polvo está a temperaturas relativamente bajas. La luminosidad total en el mapa es  $L_{LWS} \simeq 8.5 \cdot 10^6 L_{\odot}$ . Las posiciones más intensas en el IR son Sgr B2(M) y Sgr B2(N)[ $\sim(0'',90'')$ ], que contribuyen respectivamente con un  $\sim 28\%$  y un  $\sim 14\%$  a  $L_{LWS}$ . El resto de las posiciones muestra flujos decrecientes según aumenta la distancia a Sgr B2(M). Para la misma distancia al centro del mapa, las posiciones al Sur son más intensas que las posiciones al Norte, mientras que la emisión del polvo en la dirección Este-Oeste es más simétrica.

Con el propósito de estimar la temperatura y la densidad de columna de polvo en la región, se ha modelado el espectro del continuo de cada posición como la suma de dos *cuerpos grises* (véase la SEC. 4.2). Se ha preferido utilizar dos componentes porque el ajuste con una única componente proporcionaba resultados muy pobres en la mayoría de las posiciones. El flujo total de la emisión del continuo en el modelo es:

$$S_{\lambda} = (1 - e^{-\tau_{\lambda}^c}) B_{\lambda}(T_c) \Omega_c + (1 - e^{-\tau_{\lambda}^f}) B_{\lambda}(T_f) \Omega_f \quad (5.1)$$

donde  $f/c$  distingue la componente fría y caliente respectivamente,  $B_{\lambda}(T_{f/c})$  es la *distribución de Planck*,  $\tau_{\lambda}^{f/c}$  es la opacidad del continuo y  $\Omega_{f/c}$  es el ángulo sólido subtendido por la componente de polvo  $f/c$ . La EC. 5.1 representa adecuadamente las características del polvo en el IR-lejano para todas las posiciones del mapa excepto Sgr B2(M,N) (véase la SEC. 4.2). Para el tratamiento de la opacidad en el continuo, se ha escogido la opacidad a 30  $\mu\text{m}$  de Draine (1989) y la siguiente ley de potencias para  $\lambda \geq 30 \mu\text{m}$ :

$$\tau_{\lambda}^{f/c} = 0.014 A_V (30/\lambda)^{\beta} \quad (5.2)$$

donde  $\beta$  es el exponente de la emisividad de los granos de polvo. Dada la gran extensión de la emisión del polvo (25 pc  $\times$  70 pc), se ha considerado que en todas las posiciones las dos componentes llenan el *haz* del telescopio ( $\Omega_{f/c} = \Omega_{LWS}$ ). La FIG. 5.2a muestra los mejores ajustes en algunas posiciones seleccionadas. Estos ajustes se obtienen para  $\beta_{caliente} = \beta_{fría} \simeq 1$ . Estos exponentes en la emisividad del polvo son similares a los obtenidos en la componente del polvo difuso en otras regiones del CG (Lis & Menten 1998). La falta de observaciones a gran escala similares en longitudes de onda submilimétricas hace que la determinación precisa de  $\beta$  sea complicada. Esto se debe que  $\beta$  tiene más influencia en la emisión del polvo en longitudes de onda milimétricas, donde la emisión es ópticamente delgada. La TABLA 5.2 muestra las temperaturas del polvo inferidas para las dos componentes para emisividades comprendidas entre los valores  $\beta_{caliente}=1.0-1.5$  y  $\beta_{fría}=1.0-2.0$ . También se han forzado modelos con  $\beta > 2$  pero los ajustes son notablemente peores. De los resultados de los modelos se concluye que las distribuciones espectrales de energía se ajustan con una componente fría a 13–22 K (dependiendo de la posición en particular) y con otra componente caliente a 24–38 K. Las temperaturas más elevadas son aquellas medidas en las posiciones al Sur de Sgr B2(M). En toda la región, la componente caliente contribuye con menos de un 10% de la opacidad total del polvo.

Como se ha dicho anteriormente, la incertidumbre en la determinación de la emisividad de los granos de polvo hace que sólo la temperatura esté determinada de forma precisa, mientras que únicamente se pueden obtener cotas a la extinción producida por el polvo en cada posición.

En la TABLA 5.3 se muestran las cotas superior e inferior derivados de los mejores ajustes (modelos con  $\beta_{caliente}=1.0$  y  $\beta_{fria}=1.0-1.5$ ). Estas cotas a la extinción han sido determinadas minimizando los valores de  $\chi^2$  obtenidos en el ajuste de cada posición. Del conjunto de modelos realizados se concluye que la extinción visual en posiciones situadas dentro de un radio de  $270''$  ( $\sim 10$  pc) es  $A_V \geq 50$  mag. En el interior de la nube de radio  $90''$  ( $\sim 4$  pc), la extinción aumenta hasta  $A_V \geq 250$  mag. Para las emisividades obtenidas,  $\beta \simeq 1$ , la opacidad total del continuo puede expresarse como  $\tau_{100} \simeq 0.0042 (A_V^f + A_V^c)$ . Por lo tanto, las regiones centrales de Sgr B2 se caracterizan por una opacidad del polvo  $\tau_{100} \geq 1$ . Es decir, el polvo es ópticamente espeso en el IR-lejano con lo que su emisión procede de las capas más externas de la nube, i.e., la gran envoltura de Sgr B2 que oculta a las regiones de formación estelar del interior.

TABLA 5.2: *Luminosidades en el rango LWS y temperaturas del polvo en Sgr B2 obtenidas ajustando la emisión del continuo en el IR-lejano con dos cuerpos grises. Los desplazamientos en segundos de arco son respecto al centro del mapa, Sgr B2(M).*

posición	$T_{polvo}^{caliente}$ (K)	$T_{polvo}^{fria}$ (K)	$L_{LWS}(L_{\odot})$
(0,810)	30-33	17-20	6.91E4
(0,630)	30-33	17-20	9.57E4
(0,450)	31-35	18-22	1.37E5
(0,270)	25-29	13-20	1.86E5
(0,180)	26-35	16-20	2.56E5
(0,-90)	27-30	17-19	6.20E5
(0,-180)	32-36	18-21	4.74E5
(0,-270)	34-38	18-22	3.61E5
(0,-450)	36-38	17-20	3.17E5
(0,-630)	32-34	18-21	1.91E5
(0,-810)	34-37	18-22	1.20E5
(270,0)	25-27	14-19	2.63E5
(180,0)	29-32	17-20	2.90E5
(90,0)	31-34	18-20	5.21E5
(-90,0)	24-26	15-19	5.07E5
(-180,0)	24-26	13-19	2.60E5
(-270,0)	24-25	13-19	2.24E5

Comparando con otras observaciones, Gordon *et al.* 1993 obtuvieron una temperatura  $T_{polvo}=19$  K a partir de observaciones milimétricas y análisis de cuerpos grises para una región de la envoltura de menores dimensiones ( $95'' \times 270''$ ). También encontraron una temperatura de color de 35 K mediante observaciones con IRAS a 100 y 60  $\mu m$  (FIG. 5.1). La temperatura de la componente de polvo fría en este trabajo es similar a la obtenida por estos autores en milimétricas y representa la temperatura promedio de la mayoría del polvo presente en la envoltura de Sgr B2. La presencia de esta componente no puede ser inferida de las observaciones fotométricas 100/60 con IRAS, pero es necesaria para ajustar correctamente el rango espectral continuo proporcionado por el ISO/LWS. Por otro lado, las observaciones con IRAS son más sensibles a la componente de polvo difuso en el CG. Las propiedades de esta componente (temperatura y opacidad) son similares a las derivadas en nuestros ajustes de la componente caliente.

### 5.3.1 Sgr B2(M) y Sgr B2(N)

Una de las propiedades más sobresalientes de la región central de Sgr B2 es el cociente de los flujos medidos en el continuo entre Sgr B2(N) y Sgr B2(M)  $[N/M]$  en función de la longitud de onda. La evidencia observacional de que  $N/M < 1$  a  $53 \mu\text{m}$  (Harvey *et al.* 1977), mientras que  $N/M > 1$  a  $1300 \mu\text{m}$  (Goldsmith *et al.* 1987) puede ser comprendida si Sgr B2(N) se encuentra en el interior de la envoltura de gas y polvo de Sgr B2(M). Esto hace que la línea de mirada hacia Sgr B2(N) posea una mayor densidad de columna de polvo, lo que resulta en una mayor emisión en longitudes de onda milimétricas. Sin embargo, parte de la emisión del polvo caliente de Sgr B2(N) en el IR-lejano es absorbida por el polvo frío asociado a Sgr B2(M), lo que conduce a un cociente  $N/M < 1$  (Thronson & Harper 1986; Goldsmith *et al.* 1990). Las observaciones con ISO/LWS muestran que  $N/M = 0.3$  a  $57 \mu\text{m}$  y  $N/M = 0.7$  a  $178 \mu\text{m}$ . Estos cocientes confirman la importancia de la opacidad del polvo incluso a  $\sim 180 \mu\text{m}$ . Debido a la complejidad de Sgr B2(M,N), en estas posiciones únicamente se ha ajustado una componente de polvo para extraer su temperatura promedio y opacidad. De los ajustes se obtiene  $\tau_{100} \simeq 3.8 \pm 0.4$  ( $T_{\text{polvo}} \simeq 31 \pm 1$  K) para Sgr B2(M) y  $\tau_{100} \simeq 5.3 \pm 0.6$  ( $T_{\text{polvo}} \simeq 26 \pm 1$  K) para Sgr B2(N) (FIG. 5.2a).

## 5.4 LÍNEAS DE ESTRUCTURA FINA

### 5.4.1 CORRECCIONES A LA EXTINCIÓN

Las elevadas densidades de columna de  $\text{H}_2$  (hasta  $\sim 10^{25} \text{ cm}^{-2}$ ) que se encuentran en la región de Sgr B2 sugieren que incluso en el IR-lejano, las líneas de estructura fina pueden sufrir una extinción apreciable. Además, la extinción interestelar promedio hacia el CG,  $A_V \simeq 25$  mag (*p.ej.*, Schultheis *et al.* 1999), también contribuye a la atenuación de la emisión atómica en la región. En este trabajo se han obtenido cotas a la extinción visual en cada posición del mapa de Sgr B2 mediante dos aproximaciones diferentes. Por un lado, se puede obtener un límite inferior a la extinción utilizando el cociente de intensidades entre las líneas de  $[\text{OIII}]52$  y  $88 \mu\text{m}$  (a partir de ahora cociente  $[\text{OIII}] 52/88$ ). Este cociente no puede ser inferior a  $\sim 0.55$ , que es el valor que se obtiene en el límite de densidad electrónica tendiendo a cero si las líneas son ópticamente delgadas. Para las posiciones observadas donde el cociente  $[\text{OIII}] 52/88$  es inferior a este límite, se ha derivado una extinción visual mínima de  $\sim 20$  mag para puntos alejados de Sgr B2(M) en más de  $450''$ , y de  $\sim 100$  mag dentro de la región con un diámetro de  $15'$  (frontera tradicionalmente utilizada para la nube de Sgr B2).

Se puede también obtener una estimación más directa de la extinción en cada posición a partir del análisis de la emisión del continuo (SEC. 5.3). Las estimaciones de la extinción producida por las componentes caliente y fría del polvo se muestran en la TABLA 5.3. En la discusión de las siguientes secciones se ha corregido la intensidad de las líneas de estructura fina por las cotas a la extinción derivadas en cada posición según este procedimiento.

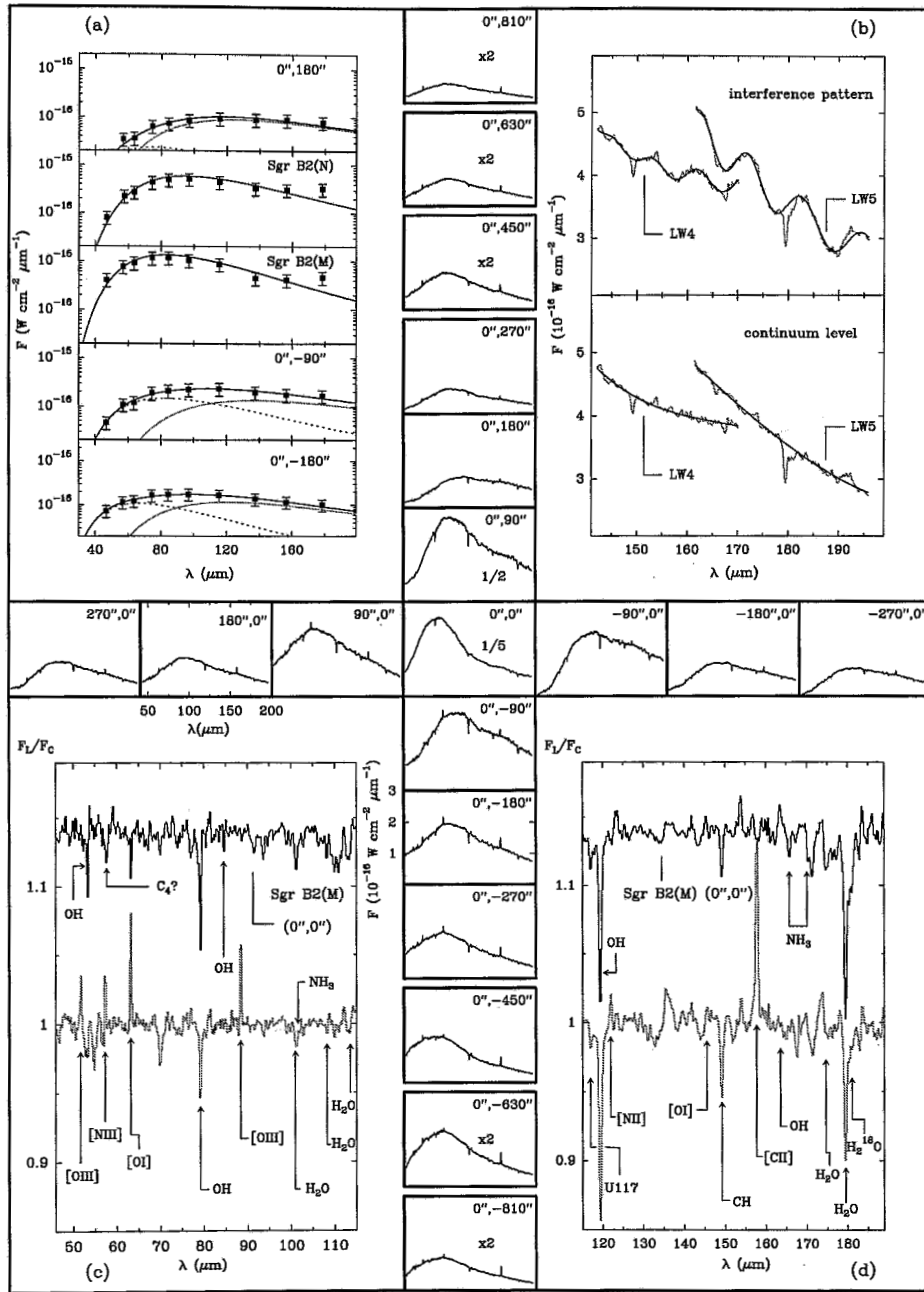


FIGURA 5.2: Mapa grating obtenido entre 43 y 197  $\mu\text{m}$  con una resolución de  $\sim 1000 \text{ km s}^{-1}$ . En cada panel se muestran los desplazamientos en segundos de arco respecto a la posición central ( $0'', 0''$ ) situada en:  $\alpha = 17^{\text{h}}44^{\text{m}}10.61^{\text{s}}$ ,  $\delta = -28^{\circ}22'30.0''$  [J1950]. La escala de intensidades corresponde al flujo observado (en unidades de  $10^{-16} \text{ W cm}^{-2} \mu\text{m}^{-1}$ ) y la abscisa corresponde a la longitud de onda en  $\mu\text{m}$ . (a) Promedio del flujo en el continuo de cada detector LWS y mejores ajustes (en negro). La línea a puntos corresponde a la componente de polvo caliente y la línea continua gris a la componente fría. Las barras de error corresponden a un 30 % de error en la calibración del flujo. (b) Superior: Patrón de interferencia observado en los últimos detectores LWS. Inferior: Nivel del continuo después de la corrección del patrón de interferencia. (c) y (d) Comparación de los espectros LWS de Sgr B2(M) [en negro] y una promedio de las posiciones ( $90'', 0''$ )+(0'', -90'')+(0'', -180'') [en gris]. En todos ellos se ha sustraído primero una línea de base polinómica. Las asignaciones más relevantes se indican con flechas.

### 5.4.2 EL GAS IONIZADO

La emisión en las líneas [OIII] que aparece en la FIG. 5.3 (vease la FIG. 5.10 para las líneas [NIII] y [NII]) muestra una componente muy extensa de gas ionizado que se extiende por las regiones Sur y Este de Sgr B2. En particular, la emisión de [OIII] 88  $\mu\text{m}$  alcanza hasta  $\sim 13.5'$  ( $\sim 35$  pc) al Sur de Sgr B2(M). La suave disminución de la intensidad de la línea en función de la distancia a Sgr B2(M) sugiere que la contribución dominante al flujo observado procede de una componente extensa de gas ionizado más que de fuentes compactas. Hay que tener en cuenta también que las radio fuentes G0.6-0.0 y Sgr B1 podrían contribuir a la ionización de las posiciones situadas al Sur de Sgr B2(M).

Para estudiar las propiedades del gas ionizado extenso en la región se ha analizado el cociente [OIII] 52/58 y el cociente entre las intensidades de las líneas [NIII] 57  $\mu\text{m}$  y [NII] 122  $\mu\text{m}$  (a partir de ahora cociente [NIII]/[NII]). La TABLA 5.3 muestra los dos cocientes después de corregir las intensidades por la extinción de cada punto.

TABLA 5.3: *Cocientes entre líneas de estructura fina en el IR-lejano corregidos por los dos límites a la extinción visual ( $A_V^{\min}$  y  $A_V^{\max}$ ) obtenidos de los mejores ajustes de la emisión del continuo ( $\beta_{\text{caliente}}=1.0$  y  $\beta_{\text{fria}}=1.0-1.5$ ). Los haces de cada detector LWS han sido tomados individualmente. Se ha considerado emisión extensa. También se muestran las densidades electrónicas y temperaturas efectivas obtenidas siguiendo la metodología de Rubin et al. 1994.*

posición <sup>a</sup>	polvo caliente $A_V$ (mag)	polvo frío $A_V$ (mag)	[OIII] R(52/88)	$n_e$ ([OIII]) $\log(\text{cm}^{-3})$	[NIII]/[NII] R(57/122)	$T_{\text{ef}}$ ( $10^3$ K)
(0,810)	1.2-1.5	15-55	<2.40	<3.18	<0.72	<33.2
(0,630)	1.6-2.0	23-84	1.79-2.23	2.83-3.10	<0.72	<33.2
(0,450)	1.1-1.8	25-92	1.36-1.73	2.49-2.79	<0.26	<31.8
(0,270)	5.2-8.0	41-112	<1.61	<2.70	<1.77	<35.6
(0,180)	0.7-1.7	131-294	<3.55	<3.66	<2.73	<35.2
(0,-90)	16-18	367-877	1.27-8.11	2.41-4.67	1.60-11.3	(35.0-37.2)
(0,-180)	3.7-5.2	148-493	0.90-3.18	1.99-3.53	0.78-2.95	(34.9-35.3)
(0,-270)	2.8-3.8	59-205	0.41-0.69	1.03-1.67	0.79-1.39	(35.0-35.8)
(0,-450)	3.2-5.3	91-249	1.47-2.64	2.59-3.30	0.35-0.64	(32.2-33.1)
(0,-630)	3.5-3.9	23-85	1.83-2.30	2.85-3.13	0.28-0.36	(31.9-32.2)
(0,-810)	1.1-1.3	16-59	0.55-0.64	1.39-1.58	0.18-0.21	(32.8-33.1)
(270,0)	27-28	156-536	<1.19	<2.24	<3.13	<36.6
(180,0)	4.9-6.6	78-276	1.14-2.38	2.28-3.18	<0.95	<33.6
(90,0)	7.4-9.0	168-565	0.62-2.64	1.53-3.30	1.31-6.07	(35.7-36.3)
(-90,0)	28-34	228-579	0.85-2.97	1.92-3.44	—	—
(-180,0)	21-26	62-168	0.43-0.63	1.10-1.55	—	—
(-270,0)	21-25	45-124	0.38-0.50	0.94-1.27	—	—

<sup>a</sup>Desplazamientos (en segundos de arco) respecto a Sgr B2(M).

## DENSIDADES ELECTRÓNICAS

El cociente [OIII] 52/58 ha sido utilizado para estimar la densidad electrónica de las posiciones observadas (vease *p.ej.*, Rubin *et al.* 1994). El cociente [OIII] 52/58 en Sgr B2 varía entre  $\sim 3$  en las regiones centrales y  $\sim 0.5$  en las regiones más alejadas. Comparando con la Figura 1 de Rubin *et al.* se encuentra que estos cocientes equivalen a densidades electrónicas que van desde  $\sim 10^3 \text{ cm}^{-3}$  en las posiciones próximas a Sgr B2(M), hasta  $\sim 50 \text{ cm}^{-3}$  en las regiones más alejadas. Promediando todos los valores se obtiene una densidad media  $n_e = 240 \text{ cm}^{-3}$ .

Las líneas de [OIII] son difícilmente detectables con el *grating* en Sgr B2(M). Sin embargo, la FIG. 5.3a muestra claramente su detección con el FP. Las dos líneas aparecen centradas a  $V_{LSR} \simeq 50 \pm 15 \text{ km s}^{-1}$  y, como se podía esperar, no muestran emisión/absorción a velocidades más negativas producidas por el gas en la línea de mirada. Esto implica que el campo de radiación UV en las nubes difusas situadas en la línea de mirada hacia el CG no es muy intenso. Utilizando estas líneas y corrigiendo el cociente [OIII] 52/58 por las  $\sim 1000$  mag de extinción visual derivadas para Sgr B2(M), se encuentra una densidad electrónica de  $\sim 10^{5.5} \text{ cm}^{-3}$ . Es decir, el gas ionizado más denso trazado por las observaciones en el IR-lejano está localizado en la posición de las regiones de formación de estrellas masivas más importantes de Sgr B2.

A partir de observaciones interferométricas a  $\lambda = 20 \text{ cm}$ , Mehringer *et al.* (1993) detectaron un halo de emisión difusa alrededor de Sgr B2 de  $\sim 7'$  ( $\sim 20 \text{ pc}$ ) de extensión. La emisión de la línea [OIII] 88  $\mu\text{m}$  en la FIG. 5.3 se extiende más allá de los contornos de la emisión de las líneas de recombinación también observados por Mehringer *et al.*

## TEMPERATURAS DE RADIACIÓN

Para estimar la temperatura efectiva de la radiación ionizante ( $T_{ef}$ ) se ha seguido el método descrito por Rubin *et al.* (1994) para el gas nebular ligado por ionización a partir del cociente [NIII]/[NII]. El procedimiento es como sigue: para cada posición se determinan las emisividades volúmicas de las líneas [NIII] 57  $\mu\text{m}$  y [NII] 122  $\mu\text{m}$  a partir de las densidades electrónicas calculadas con el cociente [OIII] 52/88. Con estas emisividades es posible calcular el cociente de abundancias  $N^{++}/N^+$ . A partir del análisis de Rubin *et al.* (vease su figura 4) y del cociente [NIII]/[NII] en Sgr B2 es posible estimar  $T_{ef}$ . La TABLA 5.3 muestra los valores encontrados. Los valores más elevados de  $T_{ef}$  se obtienen en la posición central con  $\sim 36000 \text{ K}$ .

Shields & Ferland (1994) han subrayado que los cocientes entre líneas de estructura fina observados en el CG pueden ser explicados con valores más elevados de  $T_{ef}$  si el flujo incidente de fotones ionizantes es menor (parámetros de ionización bajos). Este caso se cumple cuando la radiación ionizante está diluida, es decir, cuando el medio es inhomogéneo y rico en condensaciones y/o cuando las fuentes ionizantes están muy alejadas del gas nebular. Esta es la situación encontrada en la *región del Arco* (también en el CG), donde se detecta una componente extensa ( $40 \text{ pc} \times 40 \text{ pc}$ ) de gas ionizado (Rodríguez-Fernández *et al.* 2001). Según estos autores, la radiación ionizante (diluida) procede de los cúmulos estelares conocidos como *Los arcos* y *El Quintuplete* y tiene temperaturas elevadas,  $T_{ef} \simeq 35000 \text{ K}$ . Estos autores concluyeron que la inhomogeneidad del medio permite que la radiación alcance grandes distancias. Si este caso también se repite en la envoltura de Sgr B2, los valores de  $T_{ef}$  derivados anteriormente tienen que ser considerados como límites inferiores.

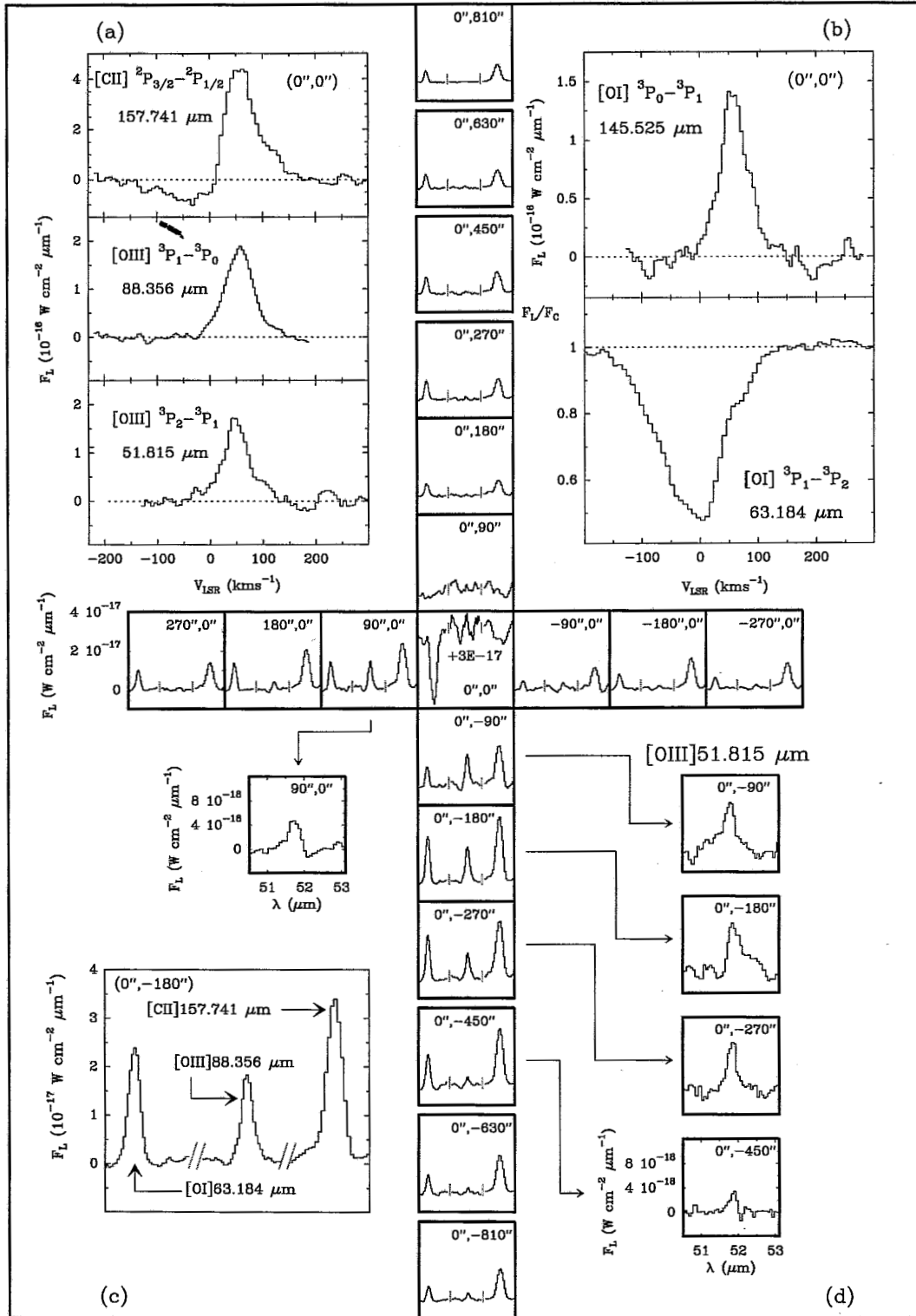


FIGURA 5.3: Mapa grating de las líneas [OI]63, [OIII]88, y [CII]158  $\mu\text{m}$ . En cada panel se muestran los desplazamientos en segundos de arco respecto a la posición central situada en:  $\alpha = 17^{\text{h}}44^{\text{m}}10.61^{\text{s}}$ ,  $\delta = -28^{\circ}22'30.0''$  [J1950]. La escala de intensidades corresponde al flujo observado de la línea y la abscisa a la longitud de onda en  $\mu\text{m}$ . (a) Líneas de [CII] y [OIII], y (b) de [OI] detectadas con el FP en (0'', 0''). (c) Principales detecciones del mapa grating. (d) Posiciones del mapa con mejores detecciones de la línea [OIII]52  $\mu\text{m}$ .



Debido a la limitada resolución espacial y espectral de las observaciones, es imposible realizar un estudio detallado de la geometría de la región. Sin embargo, si se han realizado modelos de fotoionización utilizando el MPE IDL CLOUDY Environment (MICE) desarrollado por H. Spoon del Max-Planck-Institut für extraterrestische Physik (MPE)<sup>3</sup>, que utiliza la versión 94 de CLOUDY (Ferland 1996). Para definir la forma del continuo ionizante se han elegido las atmósferas estelares de Schaerer & de Koter (1997). Primeramente se ha considerado a Sgr B2 como una esfera de radio 22.5 pc y una ley densidad (en  $\text{cm}^{-3}$ ) similar a la obtenida por Lis & Goldsmith (1990) a partir de observaciones a gran escala de CO  $J=1-0$ :

$$7 \times 10^5 \quad 0.3 < r \text{ (pc)} < 1.25 \quad (5.3)$$

$$7 \times 10^5 \left( \frac{1.25}{r} \right)^2 + 2000 \quad 1.25 < r \text{ (pc)} < 22.5 \quad (5.4)$$

donde  $r$  es la distancia radial en pc. Se ha considerado que la fuente central se sitúa en el centro de la nube y que el flujo de fotones del continuo Lyman,  $Q(H)$ , es  $10^{50.3} \text{ s}^{-1}$  (aproximadamente igual al  $Q(H)$  total en el interior de Sgr B2(M,N,S); Gaume *et al.* 1995). El continuo ionizante elegido es el de una atmósfera estelar con  $T_{ef}=37800 \text{ K}$  (similar a la máxima  $T_{ef}$  obtenida del análisis del cociente entre las líneas de nitrógeno). Los resultados de este primer modelo muestran que el radio de la región [NII] no se extendería más allá de 1 pc. Además se ha comprobado que lo mismo ocurre para un modelo con  $Q(H)=10^{51.3} \text{ s}^{-1}$  y una atmósfera de 41700 K. Claramente, este modelo homogéneo de alta densidad no explica la extensión observada de la región ionizada.

En vez de realizar un modelo tridimensional complejo considerando la inhomogeneidad del medio, se han tratado las diferentes posiciones observadas como regiones independientes separadas de Sgr B2(M) por una distancia igual a la distancia proyectada en el plano del cielo. Este nuevo modelo asume que el medio es inhomogéneo y que la radiación procedente del centro de la nube puede alcanzar todas las posiciones. El modelo si considera la dilución en la radiación producida por la distancia que separa cada posición de Sgr B2(M), de donde se supone que surge todo el flujo  $Q(H)$ . Para ello, se define el parámetro de ionización  $U$  definido como:

$$U = \frac{Q(H)}{4\pi n_e c D^2} \quad (5.5)$$

donde  $n_e$  es la densidad electrónica,  $c$  es la velocidad de la luz y  $D$  es la distancia del gas nebuloso a la fuente ionizante. En el modelo se ha escogido en cada posición donde  $n_e$  es la densidad electrónica promedio derivada del análisis del cociente de líneas [OIII],  $n_e=240 \text{ cm}^{-3}$ .

La FIG. 5.4 ilustra el resultado de alguno de los modelos para la dirección Norte-Sur en función de la distancia a Sgr B2(M) y del cociente [NIII]/[NII]. Las líneas en negro muestran que los cocientes observados pueden ser reproducidos con un flujo  $Q(H) \simeq 10^{50.3} \text{ s}^{-1}$  procedente del centro de la nube y  $T_{ef}=35500 \text{ K}$  (líneas a trazos) y  $36300 \text{ K}$  (líneas a trazos y puntos). Desafortunadamente, las barras de error debidas a la incertidumbre en la determinación de la extinción en cada posición hacen imposible un análisis más preciso.

Parece sin embargo, que los cocientes [NIII]/[NII] en las posiciones al sur de Sgr B2(M) son más elevados que lo que cabría esperar en relación al modelo y a los cocientes observados en la vecindad de Sgr B2(M). Esto puede indicar que estas posiciones están afectadas por la presencia de otras fuentes ionizantes en la vecindad de Sgr B1.

<sup>3</sup>MICE (MPE) está subvencionado por DLR (DARA) bajo los proyectos 50QI86108 y 50QI94023.

A la vista de estos resultados, se ha intentado tener en cuenta el efecto de Sgr B1 en la ionización de la región suponiendo que la  $T_{\text{ef}}$  de la radiación procedente de Sgr B1 es similar a la tratada para Sgr B2. Para ello se ha estimado un parámetro de ionización total dado por:

$$U = \frac{1}{4\pi n_e c} \left( \frac{Q(H)_2}{D_2^2} + \frac{Q(H)_1}{D_1^2} \right) \quad (5.6)$$

donde  $Q(H)_2$  y  $Q(H)_1$  son los flujos de fotones en el continuo Lyman procedentes de Sgr B2(M,N) y Sgr B1, y  $D_2$  y  $D_1$  son las distancias de las posiciones observadas a Sgr B2(M) y Sgr B1. Las líneas rojas en la FIG. 5.4 representan algunos resultados para estos modelos combinados con  $Q(H)_1 = 10^{49}$  y  $10^{49.5} \text{ s}^{-1}$  (Mehring *et al.* 1992). La inclusión de Sgr B1 permite explicar mejor los cocientes  $[\text{NIII}]/[\text{NII}]$  en las posiciones  $(0'', -450'')$  y  $(0'', -630'')$ . Sin embargo, el cociente observado en  $(0'', -810'')$  sigue siendo superior al esperado. Por lo tanto, se concluye que no se puede descartar la presencia de otras fuentes de ionización en la región Sur de Sgr B2.

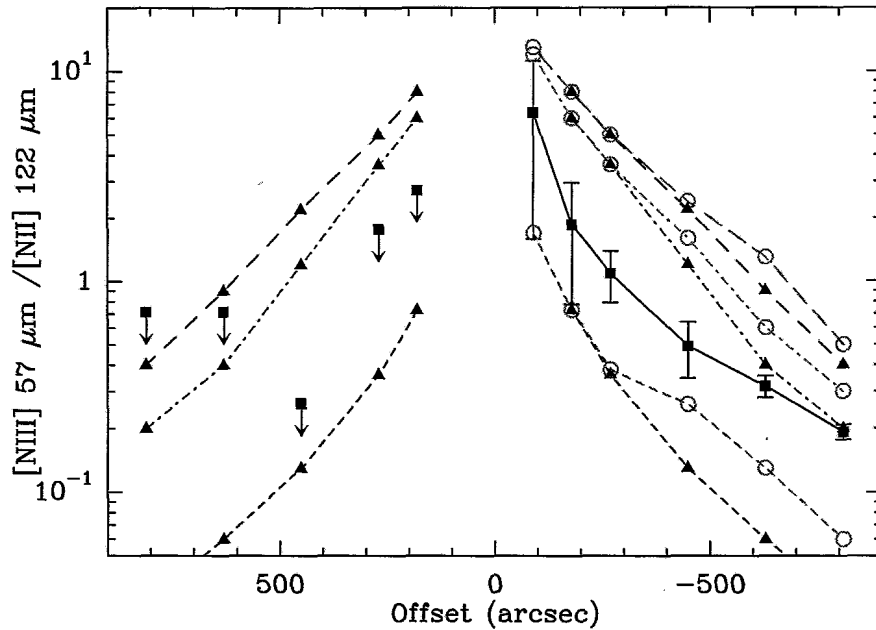


FIGURA 5.4: Resultados de los modelos de fotoionización en la región de Sgr B2. Los cuadrados muestran los cocientes  $[\text{NIII}]/57 \mu\text{m}/[\text{NII}]/122 \mu\text{m}$  derivados de las observaciones en la dirección Norte-Sur. Las flechas indican que en esos puntos los cocientes son límites superiores. Los límites superiores en las posiciones Sgr B2(M)[ $(0'', 0'')$ ] y Sgr B2(N)[ $(0'', 90'')$ ] no son significativos por lo que no se muestran. Los triángulos sólidos y los círculos huecos representan los resultados de diversos modelos de fotoionización para  $n_e = 240 \text{ cm}^{-3}$  teniendo en cuenta sólo Sgr B2 (triángulos) y tanto Sgr B2 como Sgr B1 (círculos). Los puntos pertenecientes al mismo modelo han sido unidos mediante una línea. Las líneas a trazos en negro (y triángulos) son modelos para  $T_{\text{ef}} = 35500 \text{ K}$  y  $Q(H)_2 = 10^{50.3} \text{ s}^{-1}$ . Las líneas a trazos en rojo (y círculos) son modelos en los que se añade la presencia de Sgr B1 con  $Q(H)_1 = 10^{49.5} \text{ s}^{-1}$ . Las líneas a trazos y puntos (y triángulos) son modelos para  $T_{\text{eff}} = 36300 \text{ K}$  y  $Q(H)_2 = 10^{50.3} \text{ s}^{-1}$ . Las líneas a trazos y puntos en rojo (y círculos) son modelos en los que se añade la presencia de Sgr B1 con  $Q(H)_1 = 10^{49.0} \text{ s}^{-1}$ . Las líneas a trazos largos (y triángulos) son modelos para  $T_{\text{eff}} = 36300 \text{ K}$  y  $Q(H)_2 = 10^{50.5} \text{ s}^{-1}$ . Las líneas a trazos largos en rojo (y círculos) se añade  $Q(H)_1 = 10^{49.0} \text{ s}^{-1}$ .

En cualquier caso, si se tiene en cuenta la simplicidad del modelo y las incertidumbres asociadas a la determinación de la extinción que produce el polvo en cada posición, se puede decir que el acuerdo entre las observaciones y los modelos teóricos es bastante satisfactorio. Véase también que todos los cocientes  $[NIII]/[NII]$  observados se encuentran entre las curvas  $T_{ef} = 35500$  y  $36300$  K (FIG. 5.4). Se concluye, por tanto, que el complejo Sgr B está iluminado por una radiación caliente procedente en su mayoría de Sgr B2(M,N,S). Además se ha visto que a la ionización de las regiones situadas al Sur de Sgr B2 también deben contribuir fuentes situadas en la vecindad de Sgr B1. Tampoco se puede descartar la presencia de otras fuentes ionizantes aún no identificadas. Los efectos a gran escala de la radiación pueden comprenderse si el medio es inhomogéneo y numeroso en condensaciones para que la radiación escape de las regiones internas del centro de Sgr B2. Sin embargo, también se requiere que la localización y distribución geométrica de las fuentes ionizantes en Sgr B2(M,N,S) sea la apropiada para ionizar predominantemente las regiones situadas al Sur y al Este.

### 5.4.3 LAS REGIONES DE FOTODISOCIACIÓN

La detección de una componente muy extensa de gas ionizado sugiere que se pueden formar numerosas PDRs en la frontera entre el gas ionizado y la componente de gas molecular más protegida de la radiación. Además, puede ocurrir que el campo de radiación UV existente en la región y la emisión de rayos-X tengan algún papel en el calentamiento del gas neutro y en la química. En las siguientes secciones se analizarán las líneas de estructura fina relacionadas con la emisión de las PDRs y se estudiará el contenido molecular a gran escala de la región.

### 5.4.4 CORRELACIÓN $[NII]$ vs. $[CII]$

La química y el calentamiento de una PDR están controlados básicamente por la densidad volúmica de hidrógeno ( $n_H$ ) y por el campo de radiación incidente en el UV-lejano ( $6 \text{ eV} < h\nu < 13.6 \text{ eV}$ ). A su vez, los refrigeradores principales de una PDR son: la emisión del polvo en el IR-lejano y la emisión en líneas de estructura fina de  $O^0$  y  $C^+$ . Por tanto, sus intensidades relativas pueden utilizarse como diagnósticos de las condiciones físicas en la PDR. El primer paso en este análisis requiere distinguir el gas difuso ionizado del gas de la PDR.

Si en una región existen y/o están asociadas la componentes de gas ionizado y de gas neutro/PDR, la emisión  $[CII]158 \mu\text{m}$  puede proceder de ambas componentes (Heiles 1994). En posiciones donde se ha detectado la línea  $[NII]122 \mu\text{m}$ , la emisión  $[CII]$  procedente del gas difuso ionizado debe estar correlacionada con la línea  $[NII]$  ya que la mayoría de la emisión de  $N^+$  procede del gas ionizado de baja densidad ( $\sim 75\%$  según Malhotra *et al.* 2001). La FIG. 5.5 muestra la buena correlación encontrada en la región de Sgr B2. Debido a la elevada  $\tau_{158}$  en las posiciones Sgr B2(M,N) (véase la absorción que produce el gas difuso en la línea de mirada; FIG. 5.3a), no se han incluido estas observaciones. La correlación observacional obtenida es:

$$I(CII)_{-11} \simeq 5.2 \cdot I(NII)_{-11} + 6.4 \quad (5.7)$$

donde  $I(CII)_{-11}$  y  $I(NII)_{-11}$  son las intensidades de las líneas  $[CII]158 \mu\text{m}$  y  $[NII]122 \mu\text{m}$  en unidades de  $10^{-11} \text{ W cm}^{-2} \text{ sr}^{-1}$ . Se puede realizar una estimación a la emisión  $[CII]$  procedente del gas PDR asumiendo que el segundo término en la relación 5.7 representa la emisión promedio de  $[CII]$  en la PDR. Por comparar con las predicciones teóricas, Malhotra *et al.* 2001 derivaron la relación  $I(CII) = 4.3 \cdot I(NII) + I(CII)_{PDR}$  para la emisión de la línea  $[CII]158 \mu\text{m}$ .

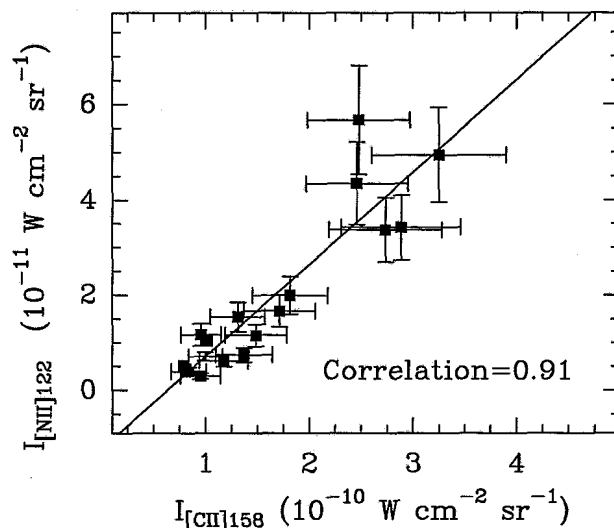


FIGURA 5.5: Correlación encontrada entre las líneas  $[NII]122 \mu m$  y  $[CII]158 \mu m$  en la región de Sgr B2. En cada posición las intensidades han sido corregidas por el límite inferior a la extinción (TABLA 5.3). Las observaciones en las posiciones (M,N) no se incluyen en la figura.

El uso de una corrección lineal para sustraer la emisión  $[CII]$  procedente del gas ionizado difuso, y la obtención de la misma intensidad de  $[CII]$  para todas las PDRs de la región es obviamente la aproximación más sencilla a la estructura y condiciones físicas de estas PDRs.

#### 5.4.5 DIAGNÓSTICOS DE LAS PDRs

Una vez estimada la emisión  $[CII]$  procedente del gas fotodisociado, se pueden comparar los diagnósticos en el IR-lejano: líneas de estructura fina  $[CII] 158$ ,  $[OI]63$  y  $145 \mu m$  y emisión del continuo, con los modelos teóricos de PDR y así estimar la densidad del gas y el campo de radiación incidente de fotones en el UV-lejano.

Debido a la absorción en las líneas  $[CII]158$  y  $[OI]63 \mu m$  que produce el gas en la línea de mirada hacia Sgr B2(M,N), en la siguiente discusión se han omitido las observaciones de dichas posiciones<sup>4</sup> (véase también Vastel *et al.* 2002). La FIG. 5.6 muestra las predicciones de varios modelos de PDR en función de los cocientes  $[CII]/[OI]$  y  $[CII]+[OI]+[SiII]/IR$ -lejano en términos de la densidad,  $n_H$ , y del flujo UV-lejano incidente ( $G_0$ ; en unidades del flujo interestelar local) procedentes del trabajo de Wolfire, Tielens & Hollenbach (1990, a partir de ahora WTH90). Sin embargo, Simpson *et al.* (1997) subrayaron que la abundancia de silicio utilizada en los modelos de WTH90 es muy pequeña, lo que hace que el efecto de no incluir las intensidades de la línea  $[SiII]35 \mu m$  en los cocientes observacionales sea mínimo. En cualquier caso, los puntos observacionales en la FIG. 5.6 no incluyen la intensidad de la línea  $[SiII]35 \mu m$  porque sólo se realizaron observaciones de la línea en la posición central (véase la detección con el SWS en la FIG. 4.12). El cociente de intensidades (sin corregir la extinción) es  $[CII]158/[SiII]35 \approx 10$ , donde la intensidad de la línea  $[CII]158 \mu m$  se refiere únicamente a la componente en emisión asociada a Sgr B2 (FIG. 5.3a).

<sup>4</sup>Las observaciones LWS/FP de la línea  $[OI]63 \mu m$  en posiciones alejadas  $\Delta\delta = \pm 180''$  de Sgr B2(M) muestran sólo emisión centrada a las velocidades propias de Sgr B2 ( $\sim 60 \text{ km s}^{-1}$ ) y ninguna contribución del gas en la línea de mirada (Lis *et al.* 2001b). En esta tesis se considera que para posiciones diferentes de Sgr B2(M,N), toda la emisión de la línea  $[OI]63 \mu m$  procede únicamente de la región de Sgr B2.

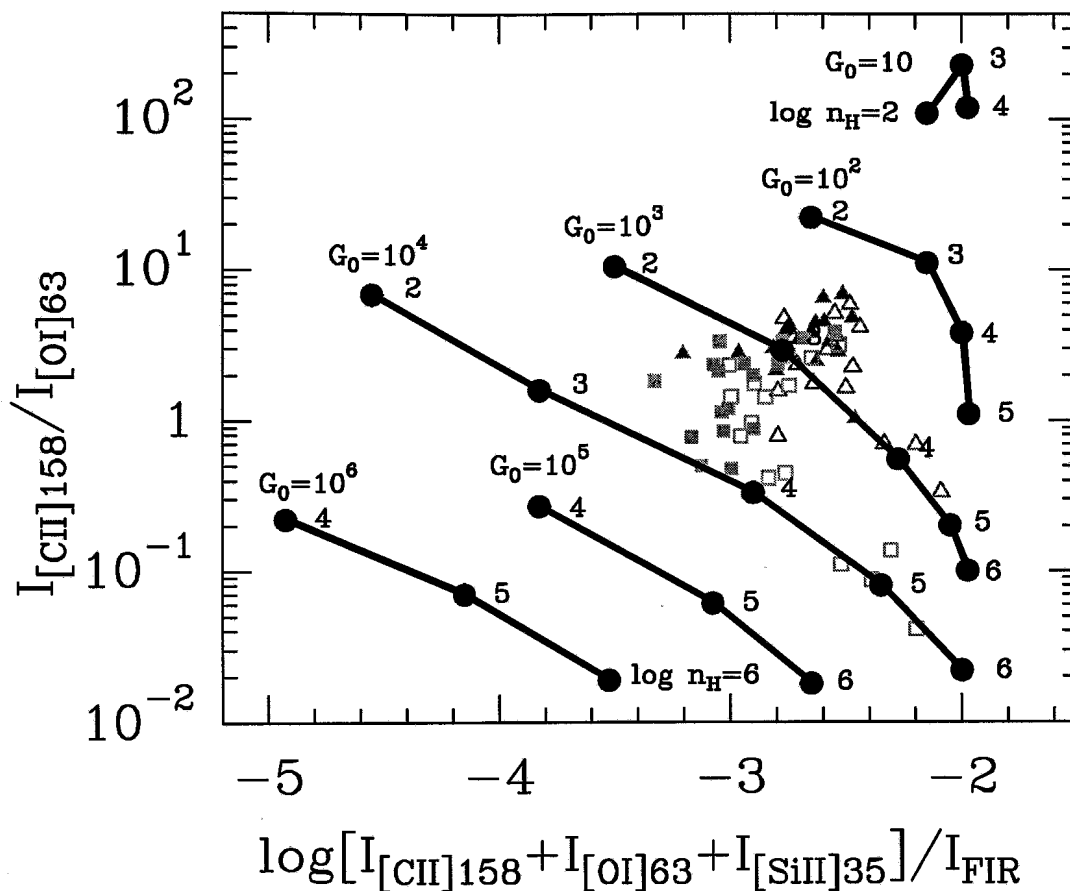


FIGURA 5.6: Cocientes  $[CII]/[OI]$  y  $[CII]+[OI]+[SiII]/IR$ -lejano para distintos modelos de PDR donde se varía el campo de radiación en el UV-lejano y la densidad de hidrógeno. Los triángulos en gris oscuro representan los cocientes utilizando toda la intensidad observada de la línea  $[CII]158 \mu m$ , mientras que los cuadrados en gris claro representan los mismos cocientes pero utilizando la intensidad promedio de  $[CII]$  procedente de las PDRs ( $6.4 \times 10^{-11} W cm^{-2} sr^{-1}$ ) estimada a partir de la correlación con  $[NII]$ . Los diferentes puntos han sido corregidos por la cota mínima (puntos rellenos) y máxima a la extinción en cada posición (puntos huecos).

Los cuadrados y triángulos en la FIG. 5.6 muestran el espacio de parámetros ocupados por la región de Sgr B2. Los triángulos en gris oscuro representan los cocientes utilizando toda la intensidad observada de la línea  $[CII]158 \mu m$ , mientras que los cuadrados en gris claro representan los mismos cocientes pero utilizando la intensidad promedio de  $[CII]$  procedente de las PDRs y que fue estimada en la sección anterior a partir de la correlación con  $[NII]$ . Los diferentes puntos han sido corregidos por la cota mínima (triángulos y cuadrados rellenos) y cota máxima a la extinción en cada posición (triángulos y cuadrados huecos). Los puntos observacionales se dispersan alrededor de las curvas teóricas para  $G_0 \simeq 10^{3-4}$  y  $n_H \simeq 10^{3-4} cm^{-3}$ . Para estos valores, la temperatura en la superficie de la PDR es  $\simeq 300 K$  (WTH90). Este valor puede alcanzar  $\sim 500 K$  si en los modelos de PDR se considera el calentamiento producido por fotoelectrones procedentes de PAHs o de granos de polvo de muy pequeñas dimensiones (Kaufman *et al.* 1999). Para las temperaturas cinéticas y del polvo encontradas en Sgr B2, los modelos de PDR también pueden reproducir las diferencias observadas  $T_g > T_d$  (p.ej., Hollenbach *et al.* 1991).

Los posibles errores en la estimación de  $n_H$  y  $G_0$  están determinados por la incertidumbre en la  $A_V$  de cada posición, la estimación de la intensidad de la emisión [CII]158  $\mu\text{m}$  asociada a la componente PDR y en los efectos como la absorción producida por el gas en la línea de mirada en las transiciones [OI]63 y [CII]158  $\mu\text{m}$  (FIG. 5.3). Además, existe cierta incertidumbre asociada a la intensidad de la línea [OI]63  $\mu\text{m}$  utilizada como diagnóstico. La intensidad real podría ser superior al valor utilizado si el gas en la línea de mirada absorbe una fracción considerable de la emisión en todas las posiciones del mapa (y no sólo hacia Sgr B2(M,N)). La línea también podría aparecer más débil (respecto a la intensidad de línea [OI]145  $\mu\text{m}$ ) si la emisión a 63  $\mu\text{m}$  estuviera saturada debido a una elevada opacidad. Finalmente, la intensidad de la línea [OI]63  $\mu\text{m}$  trazadora de la PDR podría también estar sobrestimada si la mayoría de la emisión procede de regiones internas (fundamentalmente moleculares) y no de las propias PDRs. En ese caso, la línea sería tan ópticamente espesa que sería complicado estimar las diferentes contribuciones a la intensidad observada.

De este análisis se concluye, por tanto, que las propiedades a gran escala de las PDRs en la región de Sgr B2 derivadas de la FIG. 5.6 tienen que ser considerados sobre el rango de densidades  $n_H=10^{3-4} \text{ cm}^{-3}$  y sobre el rango de flujo incidente en el UV-lejano  $G_0=10^{3-4}$ .

## CONTRIBUCIÓN DE LOS CHOQUES

La componente extensa de gas ionizado en la FIG. 5.3 indica la presencia de un campo de radiación en el UV-lejano que ilumina toda la región de Sgr B2. Aunque los modelos de PDR explican satisfactoriamente los cocientes de intensidades entre las líneas de estructura fina, también hay que considerar el posible papel de los choques a gran escala en la excitación de las líneas de [CII] y [OI]. Estos choques existen en la región de Sgr B2 (Hüttemeister *et al.* 1995; Martín-Pintado *et al.* 1997). Debido a la poca eficiencia del efecto fotoeléctrico como mecanismo de calentamiento del gas, el cociente entre la emisión integrada ([OI]63+[CII]158) y la emisión integrada del continuo en el IR-lejano no puede ser mayor que  $\sim 10^{-2}$  en PDRs. Por otro lado, este cociente es al menos un orden de magnitud superior si la emisión de [OI] y [CII] procede de gas chocado (Hollenbach & McKee 1989). La FIG. 5.6 muestra que la emisión extensa de [OI] y [CII] está dominada por el escenario PDR.

Es interesante comparar también las predicciones de los modelos de PDR y los modelos de choques con las intensidades absolutas en el rango de densidades  $n_H=10^{3-4} \text{ cm}^{-3}$ . En la SEC. 5.4.4 se ha estimado que la intensidad de la línea [CII]158  $\mu\text{m}$  procedente de las PDRs es  $\sim 6.4 \times 10^{-11} \text{ W cm}^{-2} \text{ sr}^{-1}$ . Este valor es consistente con las predicciones de los modelos de PDR de Hollenbach *et al.* (1991) para  $G_0 \sim 10^3$ . Tan solo los modelos de choque tipo-*J* de Hollenbach & McKee (1989) predicen emisión [CII], pero la intensidad de la línea es algunos órdenes de magnitud más débil que la observada salvo que la velocidad de los choques fuera muy alta ( $v_S \sim 100 \text{ km s}^{-1}$ ). Las anchuras de las líneas espectrales observadas en la región son incompatibles con estas elevadas velocidades. El promedio de la intensidad observada de la línea [OI]145  $\mu\text{m}$  excluyendo Sgr B2(M,N) es  $\sim 2.3 \times 10^{-11} \text{ W cm}^{-2} \text{ sr}^{-1}$ , valor que concuerda en un factor  $\sim 2$  con la predicción del modelo PDR. Los modelos de choques tipo-*C* de baja velocidad ( $v_S \sim 10 \text{ km s}^{-1}$ ) de Draine *et al.* (1983) predicen valores menores para la intensidad de esta línea. Comparando estas dos predicciones con la intensidad promedio de la línea observada, se ha estimado que la contribución de los choques tipo-*C* a la emisión observada a gran escala de [OI] es del 10-30 %.

## 5.5 EL GAS MOLECULAR

La mayoría de las líneas rotacionales puras de moléculas ligeras aparecen en el dominio del IR-lejano y en la región submilimétrica del espectro. La detección de este tipo de especies proporciona un avance en la comprensión de los diferentes mecanismos químicos que conducen a la riqueza observada en las nubes moleculares del ISM. En este contexto, las observaciones de líneas de absorción en el IR-lejano trazan las condiciones del gas extenso y de menor densidad (*i.e.* las envolturas) que el gas excitado por colisiones que se observa en los *surveys* de líneas en emisión. La mayoría de estos *surveys* hacia Sgr B2 han sido realizados en las posiciones de (M,N) y en milimétricas (Cummins, *et al.* 1986; Sutton *et al.* 1991; Nummelin *et al.* 1998). Sin embargo, poco o nada se sabe de la posible distribución a gran escala de estas especies.

### 5.5.1 Sgr B2(M)

La resolución espectral de las observaciones en el modo *grating* es bastante limitada ( $\sim 1000 \text{ km s}^{-1}$ ) y produce una fuerte dilución cuando se observan líneas moleculares en la mayoría de fuentes del ISM. Para tener una idea de la densidad de líneas y del contenido molecular de Sgr B2(M), en la SEC. 4.1 se mostraron las detecciones realizadas sobre los espectros LWS/FP a mayor resolución ( $\sim 35 \text{ km s}^{-1}$ ). La FIG. 4.2 muestra las especies más abundantes que pueden ser detectadas con ISO en el IR-lejano y proporciona la pista de aquellas especies que podrían ser detectadas en el modo *grating* en otras posiciones. Se recuerda que las líneas detectadas en Sgr B2(M) se puede clasificar en: **líneas rotacionales** de especies oxigenadas como  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ , OH,  $^{18}\text{OH}$ ,  $^{17}\text{OH}$  y  $\text{H}_3\text{O}^+$ , especies nitrogenadas como NH,  $\text{NH}_2$  y  $\text{NH}_3$ , así como otras moléculas diatómicas como CH, HD o HF; y **modos de flexión** de cadenas lineales de carbono no polares como  $\text{C}_3$  y  $\text{C}_4$  (sólo en el *grating*; vease el CAP. 8). En la siguiente sección se analiza las principales líneas moleculares que producen absorción extensa en los mapas *grating* de la región: OH,  $\text{H}_2\text{O}$  y CH.

### 5.5.2 ABSORCIÓN EXTENSA DE OH, $\text{H}_2\text{O}$ Y CH

Aunque la resolución espectral en el modo *grating* es reducida, la gran anchura de las líneas espectrales observadas hacia en el CG ( $\geq 30 \text{ km s}^{-1}$ ) y la FIG. 4.2 puede ayudar a identificar las moléculas más abundantes a gran escala. En casi todas las posiciones observadas de la región de Sgr B2 se detectan claramente las líneas procedentes del nivel rotacional fundamental de OH ( $\sim 79$  y  $\sim 119 \mu\text{m}$ ), CH ( $\sim 149 \mu\text{m}$ ),  $\text{H}_2\text{O}$  ( $\sim 179 \mu\text{m}$ ) y  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  ( $\sim 181 \mu\text{m}$ ; Cernicharo *et al.* 1997a; posiblemente contaminada por  $\text{H}_3\text{O}^+$ , vease la SEC. 4.3). Esto implica que estas especies ligeras están presentes en una región de dimensiones  $25 \text{ pc} \times 70 \text{ pc}$ . Existe otro conjunto de líneas moleculares que producen emisión/absorción menos extensa pero que su asignación definitiva requiere observaciones de mayor resolución. Este segundo grupo de líneas incluye:  $\text{H}_2\text{O}$  ( $\sim 180$ ,  $\sim 175$ ,  $\sim 108$ , y  $\sim 101 \mu\text{m}$ );  $\text{NH}_3$  ( $\sim 170$  y  $\sim 166 \mu\text{m}$ ); OH ( $\sim 163$ ,  $\sim 84$  y  $\sim 53 \mu\text{m}$ ) y  $\text{C}_4$  ( $\sim 58 \mu\text{m}$ ; vease la SEC. 8.3). El resto de las absorciones que no aparecen en las observaciones de Sgr B2(M) en la FIG. 4.2 hay que considerarlas con precaución. Nótese que no se detecta ninguna línea de CO en los espectros *grating* ni en el *Fabry-Perot* de Sgr B2(M).

Otro resultado curioso es presencia de una línea/banda en absorción sin identificar a  $\sim 117 \mu\text{m}$  (U117) (FIG. 5.10). La línea absorbe un  $\simeq 4\%$  en casi todas las posiciones del mapa y está presente en todos los *scans*. En la SEC. 5.5.3 se presenta un posible candidato a la absorción.

## ABSORCIÓN DE OH A GRAN ESCALA

Según los modelos químicos, el radical OH es un importante intermediario en la formación de especies presentes tanto en el gas denso  $n_{H_2} \sim 10^4 \text{ cm}^{-3}$  (Bergin *et al.* 1995) como en el gas difuso  $n_{H_2} \sim 10^2 \text{ cm}^{-3}$  (Van Dishoeck & Black 1986). La abundancia típica de OH en las nubes moleculares es de  $(0.1-1) \cdot 10^{-7}$ , aunque existen predicciones teóricas que indican que podría ser más elevada en regiones sometidas a choque de tipo-C (Draine *et al.* 1983) y en las regiones externas de una PDR donde el  $H_2O$  se fotodisocia (Sternberg & Dalgarno 1995). En la SEC. 4.5 se comentó que los modelos de choques específicos para las condiciones de Sgr B2(M) no reproducen el cociente de abundancias OH/ $H_2O$  encontrado en el CAP. 4 para la envoltura caliente de Sgr B2(M). Este cociente parecía más consistente con las predicciones de los modelos de PDRs. En las capas más protegidas de la radiación UV de una PDR, la fotodisociación de OH conduce también a la formación de  $O^0$ . Aunque en una PDR, la emisión en líneas de [OI] puede proceder de regiones más internas de la nube que OH (Sternberg & Dalgarno 1995), se puede esperar que exista una correlación en las capas externas de la nube entre la emisión/absorción de ambas especies. De existir, esta correlación demostraría la relación del gas de la envoltura de Sgr B2 en sus diferentes fases, ionizado-PDR-molecular.

Los mapas de la región muestran la absorción a gran escala producida por las líneas de OH  $^2\Pi_{3/2} J = 5/2 \leftarrow 3/2$  a  $\sim 119 \mu\text{m}$  (FIG. 5.10) y  $^2\Pi_{1/2} \leftarrow ^2\Pi_{3/2} J = 1/2 \leftarrow 3/2$  a  $\sim 79 \mu\text{m}$  (FIG. 5.8). Las dos líneas están contaminadas por las líneas análogas de sus especies isotópicas  $^{18}\text{OH}$  y  $^{17}\text{OH}$ . La resolución no permite resolver los dobletes- $\Lambda$  individuales (sólo es posible con el LWS/FP, véase la FIG. 4.12). La línea a  $\sim 119 \mu\text{m}$  se detecta en todas las posiciones con una absorción considerable (en promedio un  $\simeq 20\%$  del continuo), consistente con la saturación de la línea. Por otro lado, la línea a  $\sim 79 \mu\text{m}$  se observa a declinaciones menores que  $\Delta\delta = 630''$ , y la absorción es mucho más sensible a las variaciones en la posición. De hecho, la absorción parece trazar las variaciones en la emisión del polvo a lo largo de la región y no necesariamente la abundancia de OH (panel superior de la FIG. 5.7). La absorción producida por otras líneas rotacionales de OH es más difícil de determinar. La línea  $^2\Pi_{1/2} \leftarrow ^2\Pi_{3/2} J = 3/2 \leftarrow 3/2$  a  $\sim 53 \mu\text{m}$  sólo se detecta claramente en Sgr B2(M,N) con una absorción del  $\simeq 3\%$  del continuo. La baja S/R de los espectros dificulta su identificación en el resto de las posiciones.

Finalmente se ha encontrado en casi todas las posiciones una línea en emisión centrada a  $\sim 163 \mu\text{m}$  (véase la FIG. 5.8). La intensidad del continuo es del 2%, valor constante en toda la región. Esta emisión procede de la línea de OH  $^2\Pi_{1/2} J = 3/2 \rightarrow 1/2$  que ha sido detectada en Sgr B2(M) con el FP (véase la FIG. 4.12). Entonces, es plausible que un mecanismo de fluorescencia (absorción de fotones en la línea a  $\sim 53 \mu\text{m}$  y emisión de fotones en la escalera  $^2\Pi_{1/2}$  a  $\sim 163 \mu\text{m}$ ) similar al encontrado en el CAP. 4 para Sgr B2(M), opere también a gran escala favorecido por la baja densidad de la envoltura de Sgr B2 y por la intensa emisión en el continuo IR-lejano.

Cuando la resolución es baja, se hace complicado discriminar que componentes en la línea de mirada del telescopio producen la absorción. Este es caso cuando las líneas observadas proceden de los niveles rotacionales fundamentales de especies ligeras como OH, CH o  $H_2O$  (véase la anchura de los perfiles en las FIGS. 5.8b y d). Para estas líneas, una fracción considerable de la absorción está producida por las nubes de baja excitación (véase la SEC. 3.2.5). El mapa FP en la dirección Norte-Sur  $\Delta\delta = \pm 270''$  de la línea de OH a  $119.442 \mu\text{m}$  (FIG. 5.10a) muestra que en todas las posiciones, la absorción está dominada por el gas frío situado a velocidades LSR negativas y no asociadas con la región de Sgr B2.



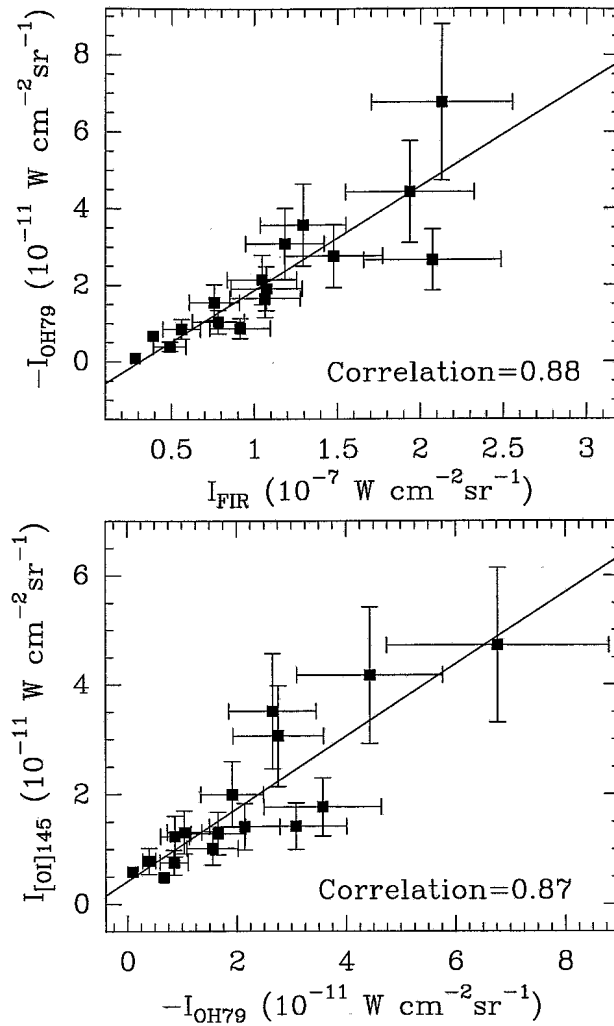


FIGURA 5.7: *Superior: Correlación observada entre la absorción de OH a  $\sim 79 \mu\text{m}$  y la emisión del continuo. Inferior: Correlación observada entre la emisión de la línea [OI]  $145 \mu\text{m}$  y la absorción de OH a  $\sim 79 \mu\text{m}$ . En ambas figuras se han excluido Sgr B2(M,N) y  $\Delta\delta = -90''$ .*

Todas las líneas observadas en el mapa LWS/FP absorben prácticamente toda la emisión del continuo. La anchura de las líneas,  $\Delta v_{\text{FWHM}} \simeq 200 \text{ km s}^{-1}$ , es mucho mayor que la resolución en velocidades de las observaciones FP. Por tanto, las líneas están saturadas e implican opacidades muy elevadas. También se ha realizado otro mapa LWS/FP similar en la línea a  $84.597 \mu\text{m}$  entre los niveles rotacionales excitados  $^2\Pi_{3/2} J = 7/2 \leftarrow 5/2$  para intentar trazar la excitación del gas OH caliente. Desafortunadamente la línea fue detectada con seguridad sólo en Sgr B2(M,N). En este caso, las líneas aparecen centradas estrictamente a las velocidades de Sgr B2 y no muestran absorción procedente del gas en la línea de mirada.

## MODELOS DE TRANSFERENCIA RADIATIVA PARA OH

La interpretación de las observaciones de las líneas moleculares en la envoltura de Sgr B2 no es trivial ya que se necesitan modelos de transferencia radiativa que tengan en cuenta simultáneamente tanto las moléculas como el polvo. La emisión del polvo en el IR-lejano juega un papel muy significativo ya que los fotones emitidos por los granos de polvo en estas longitudes

de onda pueden excitar las transiciones rotacionales de moléculas como OH. En Sgr B2(M,N) los granos de polvo también pueden absorber los fotones emitidos por las propias moléculas. En nubes moleculares como Sgr B2, donde la emisión y opacidad del continuo en el IR-lejano son sustanciales, estas condiciones implican que la envoltura externa puede absorber tanto la emisión del polvo como la emisión molecular procedente del interior de la nube (si alguna fracción significativa de la emisión consigue escapar de las condensaciones centrales).

Las observaciones a gran escala de OH han sido modeladas con el mismo código no local (vease González-Alfonso & Cernicharo 1993) utilizado en el análisis de las líneas de OH observadas en Sgr B2(M) con alta resolución (SEC. 4.5). Puesto que en los mapas *grating* se detecta claramente un número menor de líneas, se ha intentado inferir las condiciones físicas aproximadas que reproducen la emisión/absorción extensa de OH. Para que las líneas de OH aparezcan en absorción, las temperaturas de excitación en las líneas *cross-ladder* y en las líneas de la *ladder*  $^2\Pi_{3/2}$  tienen que ser menores que la temperatura del polvo (TABLA 5.2). Además, la emisión a  $\sim 163 \mu\text{m}$  no puede ser muy intensa y la absorción a  $\sim 84 \mu\text{m}$  tiene que ser prácticamente insignificante lejos de las posiciones de Sgr B2(M,N).

De esta información se infiere que la componente extensa de OH tiene una densidad moderada,  $n(\text{H}_2)=10^{3-4} \text{ cm}^{-3}$ , y un límite inferior de  $T_k \sim 100 \text{ K}$  en Sgr B2(M,N), y de  $T_k \sim 40 \text{ K}$  en la envoltura extensa. Nótese que el análisis de un mayor número de líneas de OH (observadas con el FP en la posición central) permite inferir  $T_k \sim 300 \text{ K}$  (SEC. 4.5). Para una temperatura cinética dada, un incremento de la densidad provocaría la aparición de perfiles asimétricos en los dobletes- $\Lambda$  y componentes en emisión en las líneas *cross-ladder* que no se observan a la resolución del LWS/FP (FIG. 4.12). En el APÉNDICE A se muestran algunos de los modelos realizados.

La opacidad en las transiciones de OH *cross-ladder* es mucho menor que en las transiciones dentro de una *ladder*. Es probable que las diferencias en las absorciones al pasar de una posición a otra reflejen variaciones en la densidad de columna de OH y/o en la intensidad del continuo (vease el panel superior de la FIG. 5.7). Las variaciones en las líneas observadas pueden ser ajustadas con densidades de columna totales de OH en el rango  $(5-10) \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$  fuera de la nube con un diámetro  $\sim 15'$ , y  $(2-5) \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$  en el interior.

De estos resultados se concluye que tanto los diagnósticos PDR como los modelos no locales de OH proporcionan condiciones físicas similares para las regiones externas de Sgr B2.

La FIG. 5.7 (panel inferior) también muestra la correlación encontrada a gran escala entre la absorción de la línea de OH a  $\sim 79 \mu\text{m}$  y la emisión de la línea [OI]  $145 \mu\text{m}$ . El nivel inferior de la transición [OI]  $^3\text{P}_0-^3\text{P}_1$  está a 230 K y la emisión es ópticamente delgada en la mayoría de las condiciones. Las observaciones LWS/FP de la línea [OI]  $145 \mu\text{m}$  en Sgr B2(M) muestran que sólo existe emisión asociada a Sgr B2 ( $V_{\text{LSR}} > 0 \text{ kms}^{-1}$ ). Por lo tanto, la mayoría de la emisión procede de las regiones más externas y calientes de Sgr B2, justamente donde tiene lugar la fotodisociación del gas producida por el campo UV incidente. Además, los modelos de PDR sugieren que OH se produce preferentemente en las regiones externas de la PDR. La buena correlación encontrada entre las líneas [OI]  $145 \mu\text{m}$  y OH  $\sim 79 \mu\text{m}$  confirma que una fracción considerable del oxígeno atómico en fase gaseosa se forma a partir de la fotodisociación de OH y/o surge de las mismas regiones de OH caliente.

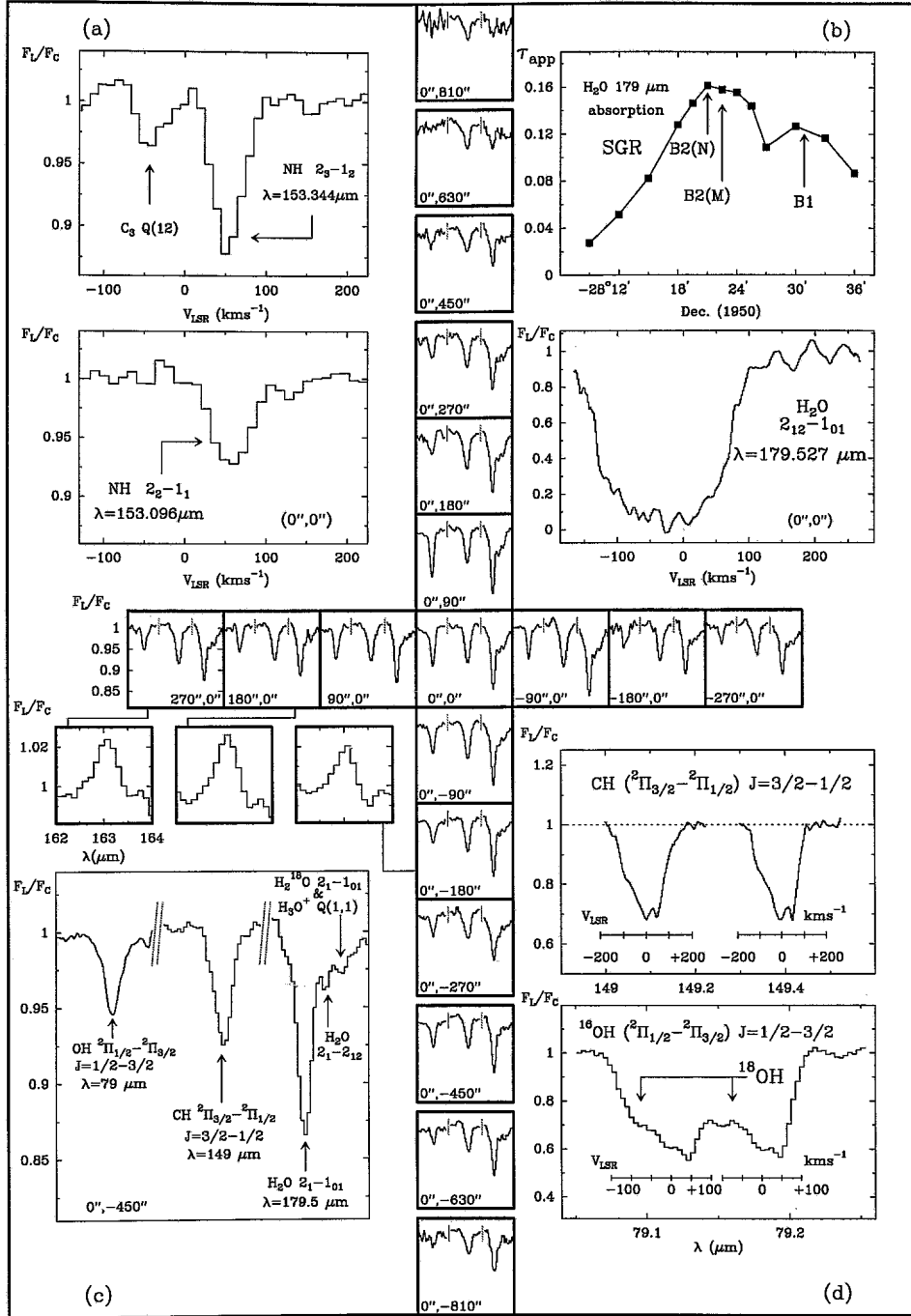


FIGURA 5.8: Mapa grating de las líneas OH( $\sim 79 \mu\text{m}$ ), CH( $\sim 149 \mu\text{m}$ ) y H<sub>2</sub>O( $\sim 179 \mu\text{m}$ ). También se presentan algunas detecciones significativas de una línea a  $\sim 163 \mu\text{m}$ . En cada panel se muestran los desplazamientos en segundos de arco respecto a la posición central situada en:  $\alpha = 17^{\text{h}}44^{\text{m}}10.61^{\text{s}}$ ,  $\delta = -28^{\circ}22'30.0''$  [J1950]. La escala de intensidades corresponde al flujo normalizado a la emisión del continuo y la abscisa a la longitud de onda en  $\mu\text{m}$ . (a) Líneas de NH detectadas con el FP en  $(0'', 0'')$  alrededor de  $\sim 153 \mu\text{m}$ . (b) Superior: Opacidad aparente de la línea  $2_{12}-1_{01}$  de H<sub>2</sub>O en la dirección Norte-Sur y posición de las principales fuentes en la región. Inferior: Línea fundamental de o-H<sub>2</sub><sup>16</sup>O alrededor de  $\sim 179 \mu\text{m}$  detectada en  $(0'', 0'')$  con el FP. (c) Principales detecciones del mapa grating. (d) Dobletes- $\Lambda$  de CH y OH detectados respectivamente alrededor de  $\sim 149$  y  $\sim 79 \mu\text{m}$  con el FP en  $(0'', 0'')$ .

## ABSORCIÓN A GRAN ESCALA DE H<sub>2</sub>O y CH

Además de la absorción a gran escala de OH descrita en la sección anterior, también se detectan las líneas fundamentales de CH a  $\sim 149 \mu\text{m}$  y de H<sub>2</sub>O a  $\sim 179 \mu\text{m}$  (FIG. 5.8). Se puede concluir que además de las componentes extensas de gas ionizado y emisión del polvo, la envoltura de Sgr B2 se caracteriza por su contenido molecular también extenso.

El mapa de H<sub>2</sub>O en la línea a  $\sim 179 \mu\text{m}$  representa una evidencia adicional de que el vapor de agua se distribuye de forma extensa en las nubes moleculares. Las observaciones de esta línea con el FP (panel inferior en la FIG. 5.8) muestran que el H<sub>2</sub>O también está presente en las nubes difusas de la línea de mirada hacia Sgr B2. El mapa completo en la línea 2<sub>12</sub>-1<sub>01</sub> muestra una variación suave de la absorción observada en la dirección Norte-Sur. Esto sugiere que la abundancia del vapor de agua y/o la excitación de la molécula también varían de forma suave al cambiar de posición. La máxima absorción se observa hacia Sgr B2 y B1 (FIG. 5.8b).

La última línea detectada a gran escala en todas las posiciones corresponde a la transición  $^2\Pi_{3/2} \leftarrow ^2\Pi_{1/2} J = 3/2 \leftarrow 1/2$  de CH a  $\sim 149 \mu\text{m}$ . El nivel rotacional fundamental  $J=1/2$  de la *ladder*  $^2\Pi_{1/2}$  producida por la interacción espin-órbita tiene las mismas propiedades de paridad que los niveles de la *ladder*  $^2\Pi_{3/2}$  (Lien 1984). Por tanto, la línea de CH a  $\sim 149 \mu\text{m}$  es la análoga a la línea fundamental  $^2\Pi_{3/2} J = 5/2 \leftarrow 3/2$  de OH a  $\sim 119 \mu\text{m}$ . Las dos componentes del desdoblamiento- $\Lambda$  sólo se resuelven con el FP (FIG. 5.8d).

Stacey *et al.* 1987 observaron previamente las líneas de CH a  $\sim 149 \mu\text{m}$  hacia Sgr B2 con KAO (sólo en la posición central). Las observaciones con ISO muestran que CH está presente en toda la región. El perfil obtenido con el LWS/FP hacia Sgr B2(M) es muy similar al observado con KAO a una resolución espectral de  $62 \text{ km s}^{-1}$  y un haz de  $55''$ . Las dos componentes del desdoblamiento- $\Lambda$  muestran anchuras similares a las observadas en las líneas fundamentales de OH y H<sub>2</sub>O producido por la absorción en las nubes situadas en la línea de mirada hacia Sgr B2. Las líneas tienen dos máximos de absorción situados a velocidades  $\simeq 0$  y  $\simeq +50 \text{ km s}^{-1}$ .

Para cada posición en el mapa de la región se ha estimado la columna de densidad del nivel rotacional fundamental de CH considerando una única línea rotacional (sin resolver el desdoblamiento- $\Lambda$ ). Para ello, las fuerzas de línea utilizadas han sido la suma de las de cada componente- $\Lambda$  calculadas a partir de las transiciones hiperfinas. Las densidades de columna del nivel  $^2\Pi_{1/2} J=1/2$  encontradas son de  $(0.8 - 1.8) \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ . Los valores más altos pertenecen a las posiciones Sgr B2(M,N). Utilizando las observaciones FP hacia Sgr B2(M) se ha encontrado una densidad de columna de  $1.7 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ , similar al valor obtenido por Stacey *et al.*

Al igual que con OH, también se ha realizado una búsqueda de líneas de CH procedentes de niveles rotacionales excitados (el primer excitado está a  $\sim 180 \mu\text{m}$ ). Sin embargo, las líneas no se detectan (a la sensibilidad del LWS/FP). La ausencia de líneas en absorción de CH, salvo aquella procedente del nivel rotacional fundamental, sugiere que la molécula sólo es abundante en las nubes presentes en la línea de mirada y en las regiones externas de Sgr B2 donde la excitación colisional no es importante. Puesto que los niveles rotacionales excitados no están suficientemente poblados, las densidades de columna derivadas más arriba son una buena aproximación de la densidad de columna total de CH. Sólo con mapas de la línea a  $\sim 149 \mu\text{m}$  de mayor resolución espectral se podrán dividir las densidades de columna entre las diversas nubes que componen la línea de mirada hacia Sgr B2. En el caso de la línea de mirada hacia Sgr B2(M), sólo el  $\sim 30\%$  de la densidad de columna total de CH está asociada físicamente a Sgr B2 (Stacey *et al.* 1987).

La falta de detecciones de CH en niveles rotacionales excitados con LWS/FP confirma que CH aparece predominantemente en las nubes de baja densidad. Debido a la elevada opacidad del continuo a  $\sim 149 \mu\text{m}$  y  $\sim 180 \mu\text{m}$ , la emisión de CH procedente de las regiones internas y densas de Sgr B2 prácticamente no contribuye a las observaciones en el IR-lejano. Esta emisión se observa sólo longitudes de onda radio (Stacey *et al.* 1987).

### 5.5.3 DETECCIÓN DE $\text{NH}_2$ Y NH EN EL IR-LEJANO

En esta sección se concluye el análisis del espectro LWS/FP de Sgr B2(M) iniciado en el CAP. 4. Aquí se presenta la primera detección de  $\text{NH}_2$  y NH en el IR-lejano. Esta es la primera vez que se observa NH en el ISM denso y la especie orto- $\text{NH}_2$  en el ISM.

#### $\text{NH}_2$

$\text{NH}_2$  es una molécula ligera y muy flexible que se espera sea un importante intermediario en la formación/destrucción de otras especies nitrogenadas como el amoníaco. Al igual que el  $\text{H}_2\text{O}$ , el  $\text{NH}_2$  es una especie asimétrica cuyo estado electrónico fundamental  $^2B_1$  se caracteriza por un espectro rotacional complicado. Debido a los dos núcleos de hidrógeno equivalentes, se pueden distinguir dos modificaciones de la especie, orto- y para-. La interacción espin-órbita causada por el electrón sin aparear produce un desdoblamiento de cada nivel rotacional en dos subniveles que vuelven a desdoblarse debido a interacciones hiperfinas causadas por el espin nuclear del  $^{14}\text{N}$ . En el caso de la especie orto-, los niveles resultantes se vuelven a desdoblar por la interacción con el espin nuclear del protón resultante.

La presencia de  $\text{NH}_2$  en colas cometarias como producto de la fotodisociación de  $\text{NH}_3$  era conocida desde los principios de los años 40 (Swings, McKellar & Minkowski 1943). Sin embargo, su detección en el ISM tuvo que esperar hasta principios de los años 90 con la detección de las líneas  $1_{10}-1_{01}$  de para- $\text{NH}_2$  en longitudes de onda milimétricas y también hacia Sgr B2 (van Dishoeck *et al.* 1993). Hasta la fecha, esta era la única detección de la molécula. En el laboratorio se han observado líneas rotacionales de  $\text{NH}_2$  en el IR-lejano (Gendriesch *et al.* 2001). En esta sección se presenta la primera detección en el espacio de algunas de ellas.

El panel inferior en la FIG. 5.10b muestra las tres componentes de espin-rotación detectadas de la línea  $2_{20}-1_{11}$  de orto- $\text{NH}_2$  a  $\sim 117 \mu\text{m}$ , y una componente de la línea  $2_{21}-1_{10}$  de para- $\text{NH}_2$  a  $\sim 126 \mu\text{m}$ . No se han encontrado más líneas de  $\text{NH}_2$  con niveles de energía  $< 100 \text{ K}$ . Las líneas detectadas están centradas a las velocidades de Sgr B2 y no se detecta absorción producida por las nubes presentes en la línea de mirada. Para calcular la densidad de columna asociada se calcularon las fuerzas de línea de las componentes de espin-rotación sumando las fuerzas de línea de las transiciones hiperfinas asociadas y que están recogidas en el catálogo CDSM (*Cologne Database for Molecular Spectroscopy*) para  $\text{NH}_2$  (Müller *et al.* 2001). Sin embargo, se han separado explícitamente las especies orto- y para- como si fueran moléculas diferentes, y todas las energías de los niveles rotacionales para- y orto- fueron referidas a la energía de los dos niveles rotacionales fundamentales (a los que se les asigna  $E = 0 \text{ K}$ ). Con estas modificaciones se calculan las funciones de partición (sólo al nivel espin-rotación). El cociente resultante entre las fuerzas de línea de las tres componentes de la línea  $2_{20}-1_{11}$  de orto- $\text{NH}_2$  es  $10.0/5.6/1.1$  ( $S_{117.8}/S_{117.4}/S_{117.1}$ ), mientras que el cociente entre las absorciones observadas con el LWS/FP en Sgr B2(M) es  $10.0/7.3/1.7$ .

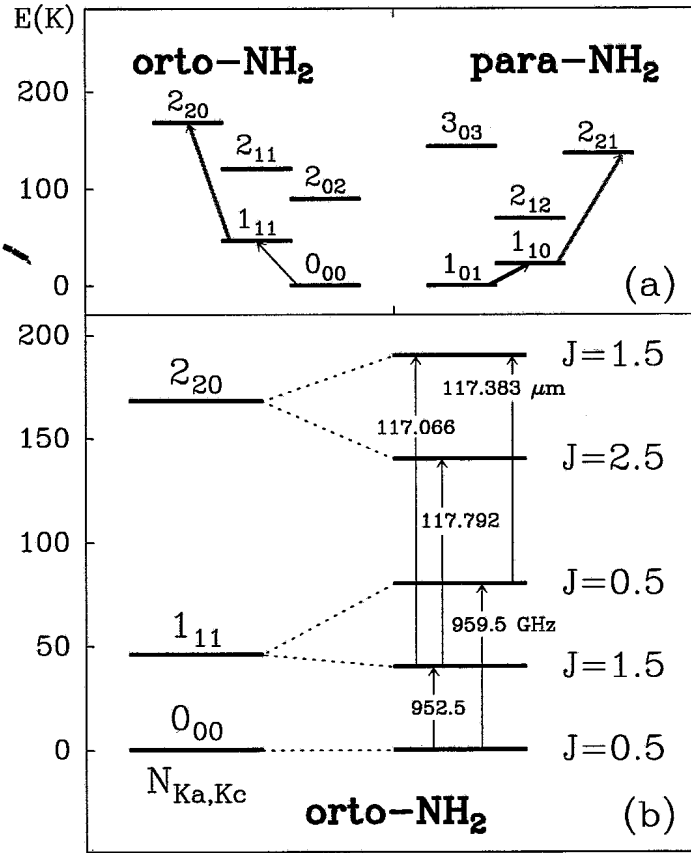


FIGURA 5.9: a) Parte del diagrama de niveles rotacionales de NH<sub>2</sub> en el que se muestran las transiciones 1<sub>10</sub>-1<sub>01</sub> de p-NH<sub>2</sub> a 461-462-469 GHz (van Dishoeck et al. 1993), 2<sub>20</sub>-1<sub>11</sub> de o-NH<sub>2</sub> a ~117 μm y 2<sub>21</sub>-1<sub>10</sub> de p-NH<sub>2</sub> a ~126 μm (este trabajo), y 1<sub>11</sub>-0<sub>00</sub> de o-NH<sub>2</sub> a 952-959 GHz (no detectada). (b) Diagrama de niveles de las transiciones rotacionales 2<sub>20</sub>-1<sub>11</sub> y 1<sub>11</sub>-0<sub>00</sub> de o-NH<sub>2</sub>. El desdoblamiento por la interacción espin-rotación ha sido exagerado.

Esto sugiere que la opacidad en la línea a 117.792 μm es moderada. Con este cociente se puede obtener la opacidad total de la línea rotacional y estimar la densidad de columna de o-NH<sub>2</sub>. Asumiendo una distribución Boltzmann de los niveles rotacionales y temperaturas de excitación entre 20 y 30 K ( $T_{ex} \leq T_{polvo}$ ) se encuentra  $N(o-NH_2) = (1.2 \pm 0.3) \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ .

Al detectarse una única componente de espin-rotación de la línea 2<sub>21</sub>-1<sub>10</sub> de para-NH<sub>2</sub> se ha tenido que asumir que la línea es ópticamente delgada. La absorción observada es entonces equivalente a  $N(p-NH_2) \simeq 4 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ . A partir de cálculos basados en la probabilidad de escape, van Dishoeck et al. obtuvieron  $N(p-NH_2) = (1.3 \pm 0.3) \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ . A la vista de los resultados aquí presentados, este último valor ha de considerarse como un límite superior a la densidad de columna de para-NH<sub>2</sub> si las líneas milimétricas (nivel fundamental) y las líneas en el IR-lejano (niveles excitados) surgen del mismo gas. Es posible también que las líneas rotacionales de NH<sub>2</sub> en el IR-lejano tracen el gas más caliente y de menor densidad de columna. En cualquier caso, y tomando en cuenta las dos observaciones, se puede concluir que la densidad de columna de NH<sub>2</sub> total (orto- + para-) es  $(1.5-3.0) \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ . El límite superior refleja la densidad de columna inferida a partir de observaciones milimétricas, y el límite inferior refleja la estimación procedente de observaciones en el IR-lejano.

Finalmente se ha explorado la posibilidad de que la línea  $U117$  ( $\sim 117.1 \mu\text{m}$ ) observada en todas las posiciones del mapa (FIG. 5.10) proceda de las tres componentes de espín-rotación de la línea rotacional  $2_{20}-1_{11}$  de orto- $\text{NH}_2$  observadas con el FP en Sgr B2(M) (FIG. 5.10b).

Se ha calculado que si la línea  $U117$  corresponde a  $\text{NH}_2$ , la absorción observada a gran escala sería equivalente a una densidad de columna de orto- $\text{NH}_2$  en cada posición de  $\sim 2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ . Sin embargo, la línea rotacional sin resolución tendría que aparecer en los espectros *grating* centrada a  $\sim 117.6 \mu\text{m}$ , lo que imposibilita una asignación definitiva a  $\text{NH}_2$ . Por tanto, se ha tenido que realizar un estudio complementario de otras especies moleculares que, por su fuerza de línea, pudieran ser responsables de la absorción observada. La conclusión es que la línea  $U117$  puede surgir de transiciones *tipo-b* de moléculas ligeramente asimétricas como  $\text{HNO}$ ,  $\text{HNCO}$ , o  $\text{HOCO}^+$ , o incluso puede ser la banda- $Q$  de algún modo de *flexión* de baja energía de una cadena lineal de carbono. Como ejemplo se pueden citar los cálculos del modo de flexión  $\nu_{11}$  de  $\text{C}_7$  alrededor de  $117-125 \mu\text{m}$  (Kurtz & Adamowicz 1991; Martin *et al.* 1995). Sin embargo, aún no se han podido asignar estas bandas en el laboratorio.

## NH

El radical  $\text{NH}$  también está directamente relacionado con la formación/destrucción del amoníaco, una de las especies más utilizadas en el estudio de Sgr B2 y de las demás nubes del CG. El espectro rotacional de  $\text{NH}$  en su estado electrónico fundamental  $X^3\Sigma^-$  también es complicado por el número de acoplamiento angulares entre la rotación, el espín electrónico, y los espines nucleares del  $^{14}\text{N}$  y  $\text{H}$  (*p.ej.*, Klaus, Takano & Winnewisser 1997). Hasta la fecha, la única detección de  $\text{NH}$  se refería a su espectro electrónico en nubes difusas y translúcidas (Meyer & Roth 1991). La elevada densidad de columna de  $\text{NH}$  en estos entornos ha sido utilizada para argumentar que la química de las especies nitrogenadas está dominada por reacciones en la superficie de los granos en vez de reacciones en la fase gaseosa (Wagenblast *et al.* 1993).

Las observaciones LWS/FP sólo pueden resolver diferentes componentes de una línea rotacional desdoblada por la interacción espín-órbita. Las dos líneas detectadas (FIG. 5.8a) proceden de la transición rotacional  $N = 2 \leftarrow 1$  cuyo nivel de energía inferior está a  $\sim 45 \text{ K}$ . Las líneas de  $\text{NH}$  detectadas sólo muestran absorción a las velocidades LSR de Sgr B2. Por tanto, representan la primera detección de  $\text{NH}$  en una nube molecular densa. Quizás las futuras observaciones de la línea fundamental  $N = 1 \leftarrow 0$  a  $\sim 1 \text{ THz}$  proporcionen la huella del  $\text{NH}$  presente en las nubes difusas en la línea de mirada hacia Sgr B2, y puedan complementar a las observaciones de  $\text{NH}$  en el medio translúcido a través de su espectro electrónico.

Para determinar la densidad de columna de  $\text{NH}$  se han calculado las fuerzas de línea de las componentes observadas sumando las fuerzas de línea de las transiciones de estructura hiperfina tabuladas en el catálogo *JPL* para  $\text{NH}$  (Pickett *et al.* 1998). Realizando un análisis similar al llevado a cabo para  $\text{NH}_2$ , se puede extraer la opacidad real de la transición rotacional  $N = 2 \leftarrow 1$  a partir del cociente de absorciones  $2_{3-1_2}/2_{2-1_1}$ . Asumiendo una temperatura de excitación entre 20 y 30 K se deriva una densidad de columna  $N(\text{NH}) = (4 \pm 2) \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ .

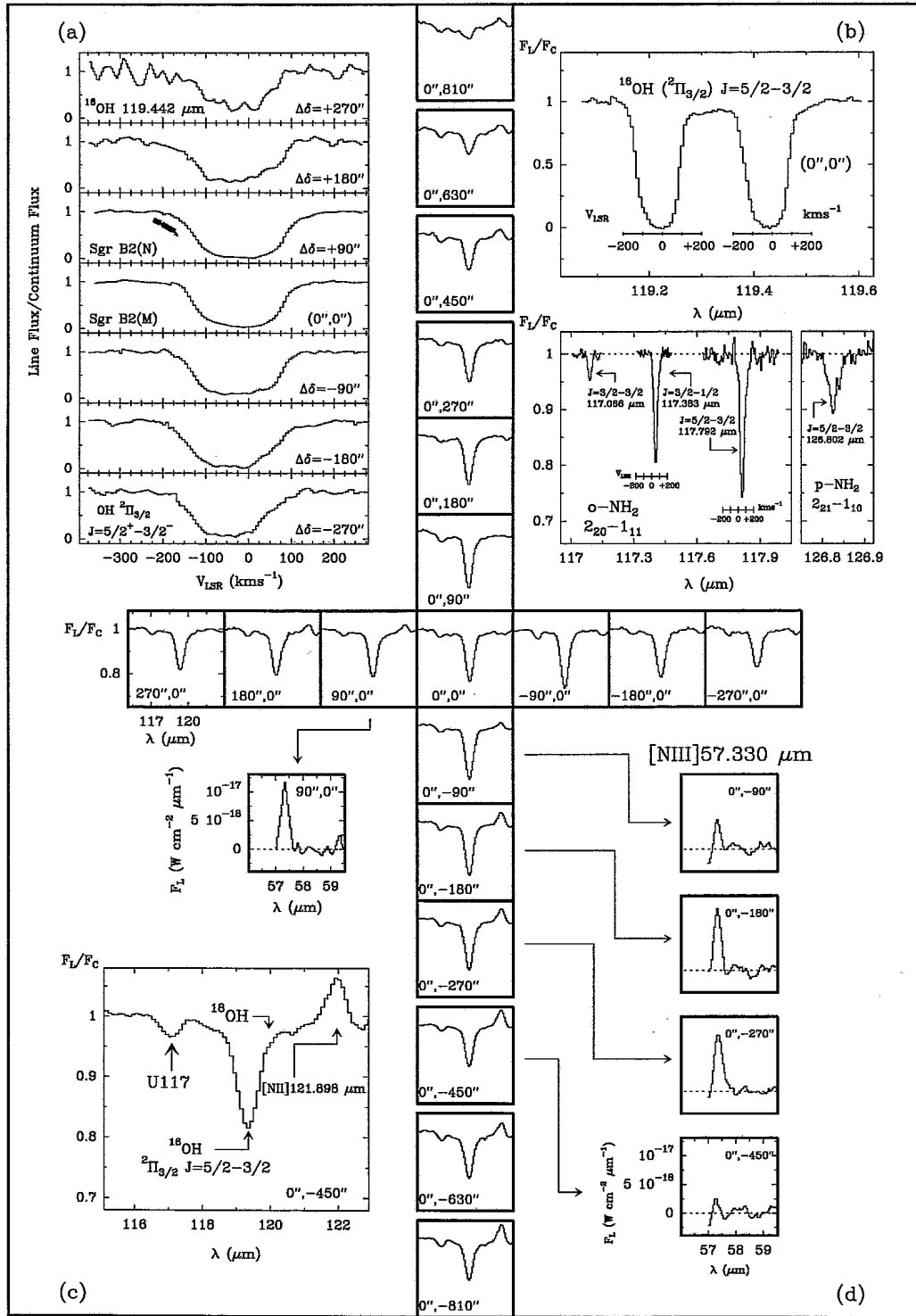


FIGURA 5.10: Mapa grating entre 115 y 121  $\mu\text{m}$ . En cada panel se muestran los desplazamientos en segundos de arco respecto a la posición central situada en:  $\alpha = 17^{\text{h}}44^{\text{m}}10.61^{\text{s}}$ ,  $\delta = -28^{\circ}22'30.0''$  [J1950]. La escala de intensidades corresponde al flujo normalizado a la emisión del continuo y la abscisa a la longitud de onda en  $\mu\text{m}$ . (a) Mapa en declinación de la línea fundamental de OH a  $119.442 \mu\text{m}$ . (b) Superior: Doblete- $\Lambda$  de OH a  $\sim 119 \mu\text{m}$  observado con el FP en  $(0'', 0'')$ . Inferior: Líneas de  $\text{NH}_2$  detectadas con el FP a  $\sim 117$  y  $126 \mu\text{m}$ . El triplete a  $\sim 117 \mu\text{m}$  podría contribuir a la línea U117 observada en todas las posiciones. (c) Principales detecciones del mapa grating. (d) Detecciones significativas de la línea  $[\text{NIII}] 57 \mu\text{m}$ .



## LOS CHOQUES Y LA QUÍMICA DEL NITRÓGENO

Las observaciones con ISO han proporcionado la oportunidad de detectar las especies  $\text{NH}_3$ ,  $\text{NH}_2$  y  $\text{NH}$  de forma simultánea. Estas moléculas representan la mejor traza de la química basada en el nitrógeno en las regiones más externas de la nube. Las líneas de amoniaco en el IR-lejano observadas con LWS/FP han sido analizadas en detalle por Ceccarelli *et al.* (2002). Sus modelos LVG concluyen que la densidad de columna de  $\text{NH}_3$  en la envoltura caliente de Sgr B2(M) es de  $(3.0 \pm 1.0) \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ . Estos autores asumieron que las líneas de amoniaco en el IR-lejano y en radio (Hüttemeister *et al.* 1995) surgen de la misma región y derivaron una temperatura de  $T_k \sim 700 \text{ K}$  para la región absorbente. Sin embargo, hay que tener en cuenta que la absorción de  $\text{NH}_3$  en el radiocontinuo está dominada por el gas molecular situado delante de las regiones HII de Sgr B2(M). Dada la gran opacidad en el IR-lejano, la mayoría del gas trazado por ISO sólo se refiere a la envoltura que rodea a las regiones de formación estelar.

Diversos estudios en la literatura concluyen que tanto el calentamiento como las densidades de columna inferidas para las transiciones metaestables del  $\text{NH}_3$  pueden ser explicadas con la formación del amoniaco en la superficie de los granos y posterior liberación a la fase gaseosa, si se tienen en cuenta choques de baja velocidad de tipo-C (*p.ej.*, Flower *et al.* 1995). De hecho, los modelos de choques para las condiciones físicas de Sgr B2(M) reproducen satisfactoriamente las densidades de columna derivadas con ISO para  $\text{NH}_3$  (Ceccarelli *et al.* ) y  $\text{NH}_2$  (este trabajo).

Sin embargo, las especiales condiciones para la formación del amoniaco (química en los granos de polvo y erosión de los mantos), y las condiciones para su supervivencia en fase gaseosa (molécula fácilmente fotodisociable), sugieren que los estudios del gas en Sgr B2 utilizando  $\text{NH}_3$  como diagnóstico, son sólo sensibles a sus particulares características.

A partir de las observaciones presentadas en este trabajo se ha encontrado que el cociente observacional de densidades de columna  $\text{NH}_3/\text{NH}_2/\text{NH} \simeq 100/10/1$  no puede ser explicado con modelos de nubes oscuras, ya que predicen un cociente  $\text{NH}_3/\text{NH}_2 < 3$ . Este cociente sería incluso menor si se añade la fotodisociación del amoniaco. Por otro lado, Sternberg & Dalgarno (1995) han propuesto un cociente  $\text{NH}_3/\text{NH}$  de columnas de densidad  $> 2 \cdot 10^3$  en las regiones donde el campo de radiación en el UV-lejano está completamente atenuado. Podría esperarse también una contribución de las PDRs a la densidad de columna de  $\text{NH}$  y  $\text{NH}_2$  como productos de la fotodisociación de  $\text{NH}_3$ . Los modelos actuales de PDRs predicen un cociente  $\text{NH}_2/\text{NH} < 1$  en las regiones directamente expuestas al campo de radiación (Sternberg & Dalgarno 1995). Estos valores no se observan al menos en el escenario promediado dentro del haz ISO/LWS. Aún así, las elevadas densidades de columna de amoniaco encontrados en la envoltura caliente de Sgr B2(M) (Ceccarelli *et al.* 2002) pueden ser compatibles con su fotodisociación. Para ello tiene que existir un aumento considerable de su formación en los granos de polvo y un mecanismo eficiente en erosionar la superficie de los mantos. Tal mecanismo son los choques de baja velocidad que supuestamente retornan grandes cantidades de amoniaco a la fase gaseosa y calientan el gas.

Como se puede apreciar, la química en Sgr B2 es un problema ciertamente desafiante ya que los mismos modelos de gas sometido a choques que aparentemente reproducen la química de las especies nitrogenadas (Flower *et al.* 1995), fallan a la hora de explicar la química de las especies oxigenadas observadas en el IR-lejano. Las predicciones para las densidades de columna del vapor de agua son, al menos, dos órdenes superiores a las observadas (SEC. 4.4), mientras que la densidad de columna de OH observada (SEC. 4.5) es un orden de magnitud mayor que las predicciones de los mismos modelos.

En este trabajo, donde se ha demostrado la existencia de un campo de radiación UV que baña la región de Sgr B2, se puede concluir que la elevada abundancia de OH parece más relacionada con la fotodisociación del agua. Además, la absorción de las líneas de OH está correlacionada con la emisión del gas caliente trazado por la línea [OI]145  $\mu\text{m}$  lo que sugiere que el oxígeno neutro también puede ser el resultado de la fotodisociación de OH en las regiones más externas de la nube.

## 5.6 VISIÓN GLOBAL DE LA REGIÓN DE SGR B2

Las observaciones espectrales y de la emisión del continuo en el IR-lejano ofrecen una nueva perspectiva de la poco conocida extensa envoltura de Sgr B2. La aportación de las observaciones con *ISO* ha sido demostrar la presencia de una componente extensa de gas ionizado que alcanza grandes distancias respecto a las regiones de formación estelar conocida. De los modelos de fotoionización se concluye que la temperatura efectiva de la radiación es elevada si el parámetro de ionización es bajo. En particular se ha encontrado que la radiación puede caracterizarse por un continuo típico de una estrella O7 ( $T_{\text{ef}} \simeq 36000$  K). Además se ha demostrado que la ionización a gran escala en el complejo de Sgr B está dominada por Sgr B2.

Las observaciones del gas ionizado, fotodisociado y molecular sugieren que la región debe ser numerosa en condensaciones, con lo que la difusión del campo de radiación UV-lejano provoca la formación de condensaciones de material ionizado/neutro (caliente)/neutro (frío). Aunque no se ha podido estimar la posición tridimensional de las fuentes ionizantes respecto a la nube extensa, esta debe determinar las regiones preferentemente iluminadas por la radiación (regiones en el Sur y Este). Parece plausible que la nube de densidad moderada alrededor de Sgr B2(M,N) pueda bloquear de alguna forma el paso de la radiación hacia las regiones situadas al Norte y al Oeste. También existe la posibilidad de que otras fuentes ionizantes, como estrellas evolucionadas y/o estrellas masivas en la propia envoltura de Sgr B2, contribuyan a la ionización de la región elevando el promedio del campo de radiación interestelar. La emisión observada en rayos-X también puede cumplir algún papel en la ionización a gran escala pero sus efectos sobre la química del gas neutro son más difíciles de determinar. En cualquiera de estos casos (o en una combinación de los mismos), se han presentado evidencias observacionales de que el gas está fotoquímicamente activo. Esto se refleja en el calentamiento del gas neutro y en las densidades de columna de algunas especies moleculares.

Los trazadores moleculares y las líneas de estructura fina no muestran evidencias de choques de alta velocidad, con lo que el gas ionizado observado no puede ser explicado en función de choques disociativos. Por tanto, se llega a la conclusión de que los ampliamente estudiados choques de baja velocidad (Hüttemeister *et al.* 1995; Martín-Pintado *et al.* 1997), no son el único mecanismo que calientan el gas por encima de la temperatura del polvo. La coexistencia de mecanismos de calentamiento mecánicos y de mecanismos radiativos (basados en los efectos de un campo de radiación UV que baña un medio inhomogéneo) parece ser el escenario dominante en la envoltura de Sgr B2.

Atendiendo a la extensa distribución espacial de especies como  $\text{H}_2\text{O}$ , OH y CH, y a la elevada densidad de columna de multitud de moléculas detectadas en la posición de central, se puede considerar que Sgr B2 es una de las nubes más peculiares y ricas de la galaxia.

Las características geométricas de Sgr B2 (medio rico en condensaciones, envoltura extensa y regiones HII en el centro de la nube); las condiciones físicas (densidades promedio elevadas, gas caliente extenso, polvo frío, turbulencia y campo de radiación UV); y la complejidad química (único lugar para detectar ciertas especies y emisión extensa de moléculas refractarias) proporcionan un centro galáctico en *miniatura* con una extensión sólo de  $\sim 15'$ . Por lo tanto, se puede concluir que Sgr B2 proporciona un buen *laboratorio* donde estudiar los procesos físicos y químicos que ocurren en un núcleo galáctico con suficiente resolución espacial. Desde los cúmulos donde empiezan a desarrollarse las estrellas masivas, hasta las regiones alejadas pero expuestas a las condiciones promedio del CG.

La resolución espectral y espacial actual hace que los estudios de núcleos extragalácticos similares al realizado en este trabajo sean notablemente especulativos. Sin embargo, parece sugerente que la extrapolación del espectro en el IR-lejano de  $\sim 1000$  nubes como Sgr B2 a una distancia de unos pocos Mpc, resulte en un espectro similar al que tendría una galaxia IR como Arp 220. La aplicación reciente de los modelos de PDR a diferentes muestras de galaxias observadas en el IR-lejano revela que las condiciones físicas de las PDRs extragalácticas no difieren demasiado de los valores inferidos para Sgr B2 (WHT90; Malhotra *et al.* 2001). Entonces, Sgr B2 también representa un buen *laboratorio* los estudios del ISM extragaláctico.

## 5.7 RESUMEN

En este capítulo se ha mostrado un análisis y un estudio de la región de Sgr B2 ( $9' \times 27'$ ) entre 43 y 197  $\mu\text{m}$ . Las conclusiones más importantes de este trabajo son:

- Las observaciones ISO/LWS muestran una **región muy extensa de emisión de polvo** ( $L_{LWS} \simeq 10^7 L_{\odot}$ ). La emisión del polvo ha sido ajustada con una componente a 13–22 K y otra componente más caliente a 24–39 K que contribuye en menos del 10% a la opacidad total del continuo.
- Después de corregir la extinción en cada posición del mapa, el estudio de los cocientes de intensidades [OIII] 52/88 y [NIII]57/[NII]122 ha revelado una **componente muy extensa de gas ionizado cuya densidad electrónica promedio es  $\sim 240 \text{ cm}^{-3}$** . La radiación ionizante puede caracterizarse con  $T_{\text{ef}} \simeq 36000 \text{ K}$  y un **parámetro de ionización bajo**. **El número de fotones Lyman necesarios para explicar la componente de gas ionizado encontrada es aproximadamente igual al disponible en las regiones HII de Sgr B2(M,N,S)**. Las regiones al Sur del complejo pueden estar influidas por otras fuentes ionizantes cercanas a Sgr B1.
- La localización y geometría de la fuentes ionizantes respecto a la nube extensa permite la ionización de las regiones al Sur y al Este de Sgr B2(M). **Un medio inhomogéneo y rico en condensaciones alrededor de estas fuentes favorece que la radiación escape y alcance grandes distancias** en la envoltura de Sgr B2. Las PDRs pueden ser abundantes en la frontera entre el gas ionizado y el neutro.
- La comparación entre las intensidades de las líneas [CII]158  $\mu\text{m}$ , y [OI]63 y 145  $\mu\text{m}$  con modelos de PDR indican **un aumento  $G_0 \simeq 10^{3-4}$  del campo de radiación en el UV-lejano y una densidad de  $10^{3-4} \text{ cm}^{-3}$  en las PDRs de Sgr B2**.

- Además de los choques de baja velocidad, la envoltura de Sgr B2 está sometida a procesos de fotoionización y fotodisociación. La complejidad química observada es posiblemente el resultado de la combinación de los dos escenarios.
- Las líneas de  $\text{H}_2\text{O}$ , OH y CH procedentes del nivel rotacional fundamental producen absorción en todas las posiciones observadas. Esto es una evidencia de que  $\text{H}_2\text{O}$ , OH y CH se distribuyen de forma extensa en las nubes moleculares.
- Los modelos de transferencia de radiación no locales de OH muestran que el gas neutro en las capas moleculares externas tiene una densidad  $n_{\text{H}_2} = 10^{3-4} \text{ cm}^{-3}$  y está a una temperatura de  $T_k = 40-100 \text{ K}$ . Estas condiciones físicas son intermedias entre las derivadas para el gas ionizado y las del gas molecular denso en las condensaciones del interior de la nube.
- El espectro LWS/FP de Sgr B2(M) mostrado en el CAP. 4 muestra las especies moleculares que pueden ser detectadas con ISO en el IR-lejano. La química  $\text{H}_2\text{O}/\text{OH}/\text{O}^0$  en la envoltura de Sgr B2 parece dominada por los procesos de fotodisociación, mientras que el cociente de densidades de columna  $\text{NH}_3/\text{NH}_2/\text{NH} \approx 100/10/1$  se explica mejor bajo la actividad de choques de baja velocidad también en la envoltura.

Los futuros instrumentos heterodinos que, como HIFI (*Herschel Space Observatory*), operen en el IR-lejano podrán observar la región de Sgr B2 y otros núcleos galácticos con gran resolución espacial y espectral. Será entonces posible la observación directa de la naturaleza inhomogénea del gas ionizado, las PDRs calientes y las regiones sometidas a choques.

## PARTE II.

ENVOLTURAS CIRCUNESTELARES: ESTRELLAS EVOLUCIONADAS

## Capítulo 6

# Las proto-Nebulosas Planetarias

Después de presentar el trabajo sobre la envoltura de Sgr B2, se pasa ahora al estudio de las envolturas circunestelares (CSEs) que forman las estrellas de masa intermedia (las más numerosas) en sus últimas etapas de evolución estelar. El interés principal de la segunda parte de la tesis se centra en estudiar el contenido molecular y la evolución química que sufren las CSEs ricas en carbono en la etapa transitoria entre la *Rama Asintótica de las Gigantes* (AGB) y la formación de *Nebulosas Planetarias* (PNe). Hasta hace muy poco, el conocimiento que se tenía sobre el estado evolutivo intermedio entre estas dos fases era limitado, tanto desde el punto de vista observacional como del teórico. La idea de que las PNes descienden de las estrellas supergigantes en fase AGB surgió a mediados de los años 70. Los objetos que trazan la transición entre las dos etapas tienen características propias y bien diferenciadas y se denominan *Proto-Nebulosas Planetarias* (PPNes). Por tratarse de fuentes muy enrojecidas por la extinción que producen sus CSEs de gas y polvo, su estudio ha evolucionado paralelamente al desarrollo de los telescopios IR y milimétricos.

Aunque la fase de PPNe representa una etapa muy corta ( $\sim 10^3$  años), por ella deben pasar las estrellas de masa intermedia ( $M_{\star} \sim 1-8 M_{\odot}$ ) antes de convertirse en una PNe y acabar su vida en forma de *enanas blancas* ( $M_{\star} \sim 0.6 M_{\odot}$ ). La característica fundamental que hace que la masa final de la estrella sea sólo una pequeña fracción de la masa inicial durante la *Secuencia de Principal* (SP), son las pérdidas de masa en forma de vientos. Estos vientos pueden llegar a tener ritmos de pérdida de masa tan altos como  $\dot{M} \simeq 10^{-4} M_{\odot} \text{ año}^{-1}$  al final de la fase AGB y son uno de los mecanismos más efectivos en reciclar y retornar material enriquecido al ISM. Antes de llegar a la etapa de PPNe, las velocidades de estos vientos son bajas ( $< 30 \text{ km s}^{-1}$ ), por lo que la inyección de energía al ISM es pequeña. Sin embargo, las observaciones de las líneas rotacionales más bajas de CO en CSEs de PPNes han mostrado la presencia de vientos rápidos de hasta  $200 \text{ km s}^{-1}$  (p.ej., Cernicharo *et al.* 1989).

En general, el conocimiento que se tiene acerca de las pérdidas de masa y la química de las CSEs en estrellas AGB es mucho más preciso que para las PPNes. Esto se debe a la dificultad de su detección por ser fuentes en el IR-lejano, y a la rápida evolución post-AGB, que hace que las PPNes sean objetos relativamente raros. El objetivo en el siguiente capítulo será utilizar la espectroscopia molecular en el IR-lejano como herramienta para trazar la evolución química de estos objetos. Particularmente nos centraremos en aquellos objetos ricos en carbono más representativos de la transición hacia las PNes (CRL 2688, CRL 618 y NGC 7027).

Además, se presentarán los primeros resultados del *survey* espectral de CRL 618 entre 82 y 276 GHz. El notable esfuerzo observacional que supone la realización de un *survey* de estas características permite determinar el contenido molecular de las especies polares más abundantes de la CSE. Finalmente, en el CAP. 8 se analiza la importancia de las cadenas lineales puras de carbono (cumulenos  $C_n$ ) en el espectro IR-lejano de las PPNe. La observación de los modos de *flexión* en IR-lejano de estas especies ofrece la posibilidad de detectar moléculas no polares (sin espectro rotacional) en las CSEs de las PPNe y en el ISM.

Las CSEs constituyen por si solas uno de los objetos más interesantes de la química del Universo. Las abundancias de una gran variedad de especies moleculares son mucho más altas en el denominado medio circunestelar (CSM) que en las nubes del ISM. En objetos como IRC+10216 se han detectado hasta 53 moléculas diferentes, muchas de ellas aún sin detectar en el ISM (*p.ej.*, Cernicharo, Guélin, Kahane 2000b). Incluso se han observado radicales cuya estructura molecular, constantes espectroscópicas y espectro rotacional eran desconocidos, contribuyendo así al desarrollo de la física y de la espectroscopia molecular.

## 6.1 EVOLUCIÓN DE ESTRELLAS DE MASA INTERMEDIA

Cuando una estrella de masa intermedia en la SP ( $\dot{M} \simeq 10^{-12} - 10^{-14} M_{\odot} \text{ año}^{-1}$ ) empieza a agotar el combustible de las reacciones termonucleares de H en su núcleo ( $\simeq 10\%$  de la conversión de H en He), la presión interna no puede con la fuerza de la gravedad y el núcleo de la estrella se comprime, aumentando la presión, la densidad y la temperatura de su interior. Durante la contracción, el núcleo alcanza los  $10^8$  K necesarios para iniciar las reacciones termonucleares que convierten He en C y O. La inyección de energía proporcionada por este mecanismo detiene la contracción del núcleo y provoca la expansión y enfriado de la envoltura estelar. Esto causa un aumento de la luminosidad y un descenso de la temperatura superficial. La estrella en expansión se enrojece y asciende por la *Rama de las Gigantes Rojas* (RGB;  $\dot{M} \simeq 10^{-9} - 10^{-10} M_{\odot} \text{ año}^{-1}$ ). Las estrellas en la RGB se caracterizan por ser pulsantes, manifestando variaciones en el radio estelar, la temperatura y la luminosidad.

Cuando la combustión del He finaliza, aquellas estrellas con masa inicial superior al límite de Chandrasekhar ( $M_{\star} > 1.3M_{\odot}$ ) formarán núcleos de C y O. Al terminarse el contenido en He del núcleo, este se volverá a contraer por el efecto dominante de la gravedad pero no alcanzará la temperatura necesaria para la ignición del C (sólo se consigue si  $M_{\star} > 10M_{\odot}$ ). La estrella se ha convertido en una *supergigante* y ha entrado en la fase AGB. Si en las estrellas masivas O-B las pérdidas de masa son importantes durante toda su evolución, en las de masa intermedia esta ocurre principalmente durante la fase AGB ( $\dot{M} \simeq 10^{-7} - 10^{-4} M_{\odot} \text{ año}^{-1}$ ), dando lugar a densas CSEs de gas y polvo a su alrededor.

En la etapa AGB, el interior de la estrella está constituido por un núcleo inerte de C y O sin actividad termonuclear y dos capas superiores donde aún se sigue produciendo la combustión nuclear. La capa interior quema He y produce más C y O, lo que hace aumentar la masa y dimensiones del núcleo. La capa externa quema H enriqueciendo la región rica en He que separa las dos capas de combustión. Por encima de estas dos capas existe una envoltura estelar convectiva (no confundir con la circunestelar) rica en H, que mediante dragados sube el material enriquecido y procesado nuclearmente a las regiones fotosféricas. En esta fase, la luminosidad de la estrella es sólo función de la masa del núcleo (*relación de Paczyński*).

Puesto que el núcleo va aumentando su masa con los productos de la capa en combustión de He, también lo hace la luminosidad. Como resultado de este proceso, la estrella asciende por la rama AGB. Simultáneamente, las pérdidas de masa crecen espectacularmente desde los  $10^{-9} M_{\odot} \text{ año}^{-1}$  al comienzo de la fase AGB hasta los  $10^{-4} M_{\odot} \text{ año}^{-1}$  cuando la abandona.

Las reacciones termonucleares que se producen en las dos capas son una configuración altamente inestable y conducen a una serie de pulsaciones térmicas en el interior de la estrella. Cuando la capa de combustión de He carece de fuentes de energía interna para mantener las reacciones nucleares, se comprime y eleva su temperatura hasta volver a conseguir la ignición de He. En este *flash* de He, la energía de la combustión nuclear es transmitida a las capas más externas, provocando su expansión y enfriamiento. Este enfriamiento detiene momentáneamente las reacciones termonucleares en la capa más externa de H y se apaga. Durante este pequeño intervalo de tiempo, la capa de He en combustión avanza por la región rica en He transformándolo en C y O hasta llegar a la ahora extinguida capa de H. Las altas temperaturas que provoca la cercanía de la capa de He, producen de nuevo la ignición de la capa de H y la producción de He. Sin embargo, el He formado en las capas externas no alcanza la temperatura necesaria para su fusión y la capa de He disminuye su tamaño hasta el punto inicial del proceso.

Durante el ciclo de pulsos térmicos (periodo  $\sim 10^3$  años), los dragados de material procesado nuclearmente son muy importantes debido al movimiento de las regiones interiores convectivas. La convección lleva este material enriquecido a las regiones fotosféricas, y es el responsable de que las abundancias relativas de los elementos químicos en las CSEs difieran notablemente de las abundancias cósmicas. Según sea la composición dominante de las CSEs podemos clasificarlas en: envolturas carbonadas ( $C/O > 1$ , estrellas-C), envolturas oxigenadas ( $C/O < 1$ , estrellas-M), y envolturas en las que  $C/O \sim 1$  (estrellas-S). Una vez alcanzada la fase AGB, los elevados ritmos de pérdida de masa hacen que la envoltura estelar vaya siendo paulatinamente expelida en forma de CSE. Desde ese momento, no se podrá acumular el suficiente C y O en el núcleo estelar como para desencadenar su fusión. Por tanto, la pérdida de masa provoca que las estrellas de masa intermedia no finalicen explotando como supernovas.

En la fase AGB la temperatura efectiva ( $T_{ef}$ ) de la estrella central es de 2000–3000 K y la luminosidad es  $10^3$ – $10^4 L_{\odot}$  (FIG. 6.1). La baja gravedad superficial en la fotosfera (debida a las enormes dimensiones de la estrella) hace que la velocidad de escape sea relativamente pequeña ( $\sim 20 \text{ km s}^{-1}$ ). Los pulsos alrededor del estado hidrodinámico de equilibrio contribuyen a que grandes cantidades de material sean expulsadas de la estrella. Al principio de la fase AGB una estrella de masa intermedia típica ( $M_{\star} \simeq 3M_{\odot}$ ) tendrá un pequeño núcleo  $M_{nucleo} \simeq 0.4M_{\odot}$  y una envoltura estelar masiva  $M_{env} \simeq 2.5M_{\odot}$ . Al final de esta fase, el núcleo habrá aumentado su masa hasta  $M_{nucleo} \simeq 0.6M_{\odot}$  y las pérdidas de masa y consiguiente formación de la CSE habrán dejado una envoltura estelar  $M_{env} \simeq 10^{-3}M_{\odot}$  (véase *p.ej.*, Lamers & Cassinelli 1999).

## 6.2 CSEs DE LAS ESTRELLAS AGB

El estudio de las CSEs de las estrellas AGB, PPNe y PNe constituye un interesante campo disciplinar intermedio entre la física estelar y la interestelar. Antes de profundizar en las CSEs de las PPNe conviene conocer primero las características físicas y químicas de sus progenitoras, las CSEs de las estrellas AGB.



Alcanzada la fase AGB, el radio típico de la CSE es de  $\sim 10^{18}$  cm ( $\sim 65000$  UA), lo cual puede constituir hasta  $\sim 10^4$  veces el radio estelar ( $R_*$ ). La CSE formada tiene simetría esférica y se expande con un campo de velocidades radial e isótropo ( $v_\infty \simeq 5-30$  km s $^{-1}$ ). La masa contenida en la envoltura circunestelar ( $M_{CSE}$ ) es aproximadamente de  $1 M_\odot$ .

La formación de la CSE está dominada por las pérdidas de masa durante la evolución post-SP. La velocidad de escape en la superficie estelar es suficientemente baja ( $\sim 20$  km s $^{-1}$ ) para que en la sucesión de pulsos térmicos, la velocidad del material fotosférico sea próxima a la de escape. Las ondas de choque generadas por la pulsación contribuyen a que las capas más externas comiencen a ser empujadas hacia una región en "levitación" próxima a la superficie estelar (Bowen 1988; Höfner *et al.* 1998). Sin embargo, se piensa que la eyección definitiva de materia hacia la CSE está dominado por otro mecanismo.

A cierta distancia de la superficie estelar ( $r=4-10 R_*$ ) la temperatura desciende por debajo de 1500-1000 K. El enfriamiento del gas (esencialmente molecular) permite la condensación del material refractario en pequeños granos de polvo (Dominik *et al.* 1993). Estos primeros granos irán aumentando de dimensión con la disminución de la temperatura ya que otras especies moleculares van depositándose en su superficie. Entonces, el campo de radiación procedente de la estrella transfiere la energía y momento lineal necesarios para que los granos de polvo comiencen a acelerarse. Debido al acomplamiento dinámico que producen las colisiones entre los granos en aceleración y las partículas del gas, la expansión de la CSE comienza a desarrollarse de forma efectiva. Por tanto, la presión de radiación sobre los granos de polvo es el responsable último de las tasas de pérdida de masa observadas en la fase AGB.

Las variaciones de la temperatura y densidad en la CSE dependen fuertemente de la distancia radial. La temperatura cinética del gas circunestelar viene determinada por el balance energético de los procesos de calentamiento (colisiones con los granos de polvo principalmente) y de enfriamiento (expansión adiabática y emisión molecular principalmente). Teniendo en cuenta la importancia relativa de cada proceso en función del radio, se obtienen temperaturas que van desde los  $\sim 1500$  K en el interior de la CSE hasta  $\sim 15$  K en las regiones más externas.

La densidad del gas,  $n(r)$ , en una CSE con simetría esférica viene determinada por la pérdida de masa  $\dot{M}(r)$  y por el campo de velocidades de expansión  $v(r)$  a través de la expresión  $\dot{M}(r) = n(r)4\pi r^2 m v(r)$ . Si se toma como aproximación que  $\dot{M} = \text{constante}$ , la distribución de densidad puede escribirse como:

$$n(r) = \frac{C}{r^2} [v_\infty / v(r)] \quad (6.1)$$

donde  $v_\infty$  es la velocidad terminal de expansión. Para unos valores típicos de  $\dot{M}(r)$  y  $v_\infty$  se obtienen densidades que van desde  $10^{8-9}$  cm $^{-3}$  a una distancia radial de  $\sim 10 R_*$ , hasta densidades de  $10^2$  cm $^{-3}$  a una distancia de  $\sim 10^4 R_*$ .

## QUÍMICA CIRCUNESTELAR en CSEs RICAS EN CARBONO

Las distribuciones de temperatura y densidad en la CSE provocan una estratificación de la envoltura en función de los mecanismos químicos dominantes. Esto da lugar a que el contenido molecular sea diferente en cada región de la CSE. Sólo las especies más estables se distribuyen eficazmente por toda la CSE (CO, HCN y C $_2$ H $_2$  principalmente). En las regiones fotosféricas y en el interior de la CSE se puede considerar que la química es independiente del tiempo (equilibrio termodinámico) ya que, en general, la velocidad de las reacciones químicas involucradas

(reacciones entre 2 y principalmente 3 cuerpos) son mayores que la velocidad dinámica de la expansión del gas en esas capas. Las constantes de velocidad para las reacciones ( $K$ ) son casi siempre desconocidas pero pueden escribirse en función de los parámetros de Arrhenius como  $K = A \exp(-E_a/kT)$ , donde  $E_a$  es la energía de activación de la reacción,  $T$  es la temperatura del gas y  $A$  es una constante. Las energías de activación típicas son  $E_a \sim 20\text{--}50$  Kcal/mol para reacciones exotérmicas entre moléculas de capa cerrada,  $E_a \sim 0\text{--}15$  Kcal/mol para reacciones molécula-radical y  $E_a \sim 0$  Kcal/mol para reacciones radical-radical. Las velocidades de las reacciones químicas entre 2 y 3 cuerpos aumentan con la pérdida de masa y disminuyen con la distancia a la fotosfera y con la velocidad de expansión. En las regiones fotosféricas y en el interior de la CSE se forman eficientemente especies como CO, HCN,  $C_2H_2$ , SiC<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>, etc., y sus abundancias están determinadas por el equilibrio termodinámico. En las regiones donde el polvo (grafito y SiC principalmente) se condensa ( $r=4\text{--}10 R_*$ ) dominan las reacciones de catálisis en la superficie de los granos, pero este ya es un proceso alejado del equilibrio (Glassgold 1999).

Para distancias radiales  $r > 100 R_*$ , la disminución de la densidad y temperatura del gas hace que las velocidades de las reacciones químicas sean demasiado lentas en comparación con los cambios en las condiciones físicas producidos por la expansión. Por tanto, las abundancias moleculares quedan “congeladas” en los valores de equilibrio. En estas capas se observan especies como CO, HCN, HNC, CS, SiC, cadenas lineales de carbono, etc. La química de las regiones más externas de la CSE también está influida por la disociación molecular que provocan los fotones UV procedentes del ISM. Este proceso fuera del equilibrio permite la formación de radicales insaturados como CN o C<sub>4</sub>H que activan notablemente las reacciones químicas aunque la temperatura y densidad hayan descendido considerablemente (Glassgold 1996). En la frontera de la CSE con el ISM ( $r > 10^4 R_*$ ), todas las especies moleculares acaban fotodisociándose.

A continuación se resumen las **características** principales de las estrellas **AGB**:

- Reacciones nucleares en dos capas situadas por encima del núcleo inerte C–O, configuración térmicamente inestable que produce pulsaciones alrededor del estado de equilibrio.
- Como resultado de las pulsaciones que alejan el material de las regiones fotosféricas hacia capas en “levitación” y la fuerte presión de radiación sobre la región de condensación del polvo, la CSE esférica se expande isotrópicamente ( $v_\infty = 5\text{--}30$  km s<sup>-1</sup>).
- La luminosidad de la estrella en su ascensión por la rama AGB ( $10^3\text{--}4 L_\odot$ ) está determinada únicamente por la masa del núcleo de C–O, la temperatura efectiva es de 2000–3000 K.

## 6.3 EVOLUCIÓN post-AGB

Al final de la fase AGB se producen las mayores pérdidas de masa ( $\simeq 10^{-4} M_\odot$  año<sup>-1</sup>) mediante un viento de alta densidad dirigido por la presión de radiación sobre los granos de polvo de la CSE. Cuando la masa de la envoltura (estelar) disminuye hasta  $\sim 10^{-3} M_\odot$ , no hay suficiente material como para soportar la fuerza de gravedad de la envoltura (estelar) convectiva y la estrella empieza a contraerse en equilibrio radiativo (para  $M_{\text{núcleo}} \simeq 0.6 M_\odot$ ; Schönberner 1983). En un diagrama de *Hertzsprung–Russell* (H–R) la estrella se mueve horizontalmente (se sigue cumpliendo la *relación de Paczyński*) aumentando su temperatura efectiva hasta  $\sim 150.000$  K cuando se alcanza la fase de PNe.

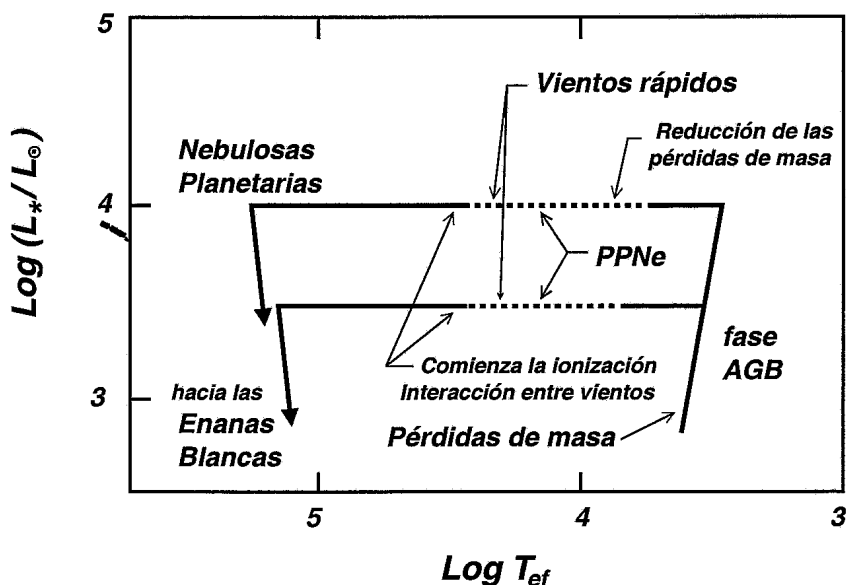


FIGURA 6.1: últimas etapas en la evolución de una estrella de masa intermedia sobre un diagrama H-R y localización de la fase PPNe. Adaptada de Kwok 1993.

Al mismo tiempo, la ausencia de suficiente material en la envoltura estelar detiene las grandes pérdidas de masa (disminuyen hasta  $\dot{M} \simeq 10^{-9} M_\odot \text{ año}^{-1}$ ). Se ha iniciado la evolución post-AGB y la estrella se ha convertido en una PPNe (véase la evolución en la FIG. 6.1).

Puesto que esta etapa de transición entre el desarrollo de una PNe y la fase AGB es muy corta ( $\sim 10^3$ ), las PPNe tendrán muchas características comunes con su progenitoras AGB (Kwok 1982). En particular, las CSEs de gas y polvo formadas durante la fase AGB seguirán presentes en la nueva etapa. Sin embargo, como veremos más adelante, los cambios estructurales que se van sucediendo en el interior de la estrella y la reducción de la pérdida de masa tendrán una gran influencia en las propiedades propias de las PPNe. Al camino casi horizontal en el diagrama H-R que separa la población más evolucionada de las estrellas AGB de las PNe más jóvenes se le denomina *línea de transito* (FIG. 6.1), y al tiempo empleado por la PPNe en recorrerlo *tiempo de transito*. Teóricamente se supone que a mitad de camino, cuando la envoltura estelar se haya reducido en un orden de magnitud más, y debido a la contracción del objeto central y a la combustión de la capa más externa de H, la temperatura efectiva de la estrella alcanzará los 30000 K. Esta temperatura es suficiente para comenzar a fotodisociar el interior de la CSE que poco a poco se habrá ido separando de las regiones fotosféricas. Simultáneamente aparecerá un viento rápido pero menos denso que el viento de la fase AGB. En su interacción con la CSE remanente, este nuevo viento comenzará a horadar la envoltura hasta cambiar su forma esférica por otras morfologías más complicadas.

Cuando las líneas de recombinación del H y las líneas prohibidas de metales sean intensas, la envoltura nebular será por fin observable en el visible. La FIG. 6.2 muestra algunas imágenes espectaculares de PPNe tomadas con el *HST*. Los vientos de la fase de PNe ( $\dot{M} \simeq 10^{-7} - 10^{-9} M_\odot \text{ año}^{-1}$ ) reducirán la envoltura estelar hasta  $\simeq 10^{-5} M_\odot$ . Por debajo de este límite, las capas estelares con reacciones termonucleares pararán toda la actividad de combustión y la enana azul central ( $M_\star \simeq M_{\text{nucleo}}$ ) comenzará enfriarse y a descender por el diagrama H-R.

Finalmente, la enana azul se convertirá en una *enana blanca* con una masa muy parecida al núcleo que tenía la estrella al abandonar la fase AGB (aumenta un poco con los productos de la combustión de las capas durante la fase PPNe). Así, la estrella que en la SP fue  $M_{\odot} < 8M_{\odot}$  se habrá convertido en una enana blanca ( $\sim 0.6M_{\odot}$ ) de muy pequeñas dimensiones ( $R_{\star} \simeq 10^{-2}R_{\odot}$ ) pero elevadas temperaturas efectivas ( $\sim 10^4$  K) (Kwok 1993, 2000; Lamers & Cassinelli 1999; Gurzadyan 1997). En esta evolución, las estrellas de masa intermedia han devuelto al ISM entre un 50 y un 90 % del material que las formaba. Se estima que el material enriquecido retornado al ISM por estrellas de masa intermedia en fase RGB, AGB, PPNe y PNe en toda la galaxia es  $\sim 0.5$  masas solares por año (Knapp *et al.* 1990).

## 6.4 PROPIEDADES DE LAS PPNeS

Existe el acuerdo generalizado de que la fase de PPNe comienza cuando cesan las copiosas pérdidas de masa características del final de la etapa AGB. Además, es un resultado observacional que desde este estadio evolutivo hasta el comienzo de la fase PNe y desarrollo de una enana azul en su interior sólo transcurren  $\sim 1000$  años (tiempo de transito). Por tratarse de objetos evolucionados y de vida muy corta, la mayoría de las PPNe identificadas están relativamente alejadas del entorno solar ( $d \geq 0.5$  kpc, véase *p.ej.*, Bujarrabal *et al.* 2001).

Como es previsible, la mayoría de los parámetros y condiciones físicas que definen a una PPNe son intermedios entre los de una estrella AGB y una PNe. El objeto central aún no es lo suficientemente caliente como para que el flujo de radiación estelar ionice completamente el material circunestelar de la CSE. Las temperaturas efectivas encontradas varían entre 3000 y 30000 K y la luminosidad es aproximadamente  $\sim 10^4 L_{\odot}$ . Siguen siendo objetos muy enrojecidos por la absorción que producen los granos de polvo de la CSE. Sin embargo, durante el tiempo de tránsito, las CSEs remanentes de la fase AGB comienzan a dispersarse. Observacionalmente esto se refleja en una disminución de la temperatura de color (de  $\sim 600$  K en la fase AGB a  $\leq 100$  K en la fase de PNe), resultado de la dilución geométrica que produce la dispersión de la envoltura de polvo (Kwok 1994). Sólo en la fase AGB la disminución gradual de los excesos de color en el IR está relacionada con el incremento de la opacidad en la CSE al aumentar  $\dot{M}$ .

En comparación con la simetría esférica de las CSEs en la fase AGB, prácticamente todas las PPNe estudiadas muestran deformaciones axiales, siendo alargadas en la dirección de un eje particular. Además, la mayoría de las PPNe muestran flujos de materia bipolares en la dirección axial (véase *p.ej.*, Trammell *et al.* 1994). La cinemática de la CSE está ahora dominada por dos componentes diferenciadas. Por un lado, la extensa envoltura remanente de la fase AGB (aproximadamente esférica) que se expande lentamente y por otro, los nuevos vientos de alta velocidad post-AGB que surgen del interior de la CSE y escapan de forma dipolar. Estos vientos son menos densos que en la fase AGB y alcanzan velocidades de  $\sim 200 \text{ km s}^{-1}$  (Cernicharo *et al.* 1989). El origen y excitación de los vientos post-AGB es todavía confuso. El flujo bipolar parece estar relacionado con el aumento de la densidad de material en el plano ecuatorial respecto a los polos, dando lugar a la formación de un disco denso de gas y polvo en el interior de la CSE. La presencia de un sistema estelar binario podría explicar la energía necesaria del viento bipolar a través de la acreción de materia procedente de la estrella secundaria (Bujarrabal *et al.* 2001).

Por otro lado, la menor densidad y opacidad en los polos permite que la luz visible escape del objeto central (veanse los casos de CRL 2688 y CRL 618 en la FIG. 6.2). Recientemente se ha demostrado que el momento lineal adquirido por los vientos post-AGB no puede ser proporcionado por la presión de radiación como ocurre en la fase AGB (Bujarrabal *et al.* 2001). De momento, el mecanismo que impulsa estos vientos bipolares sigue siendo desconocido.

## VARIACIONES EN LA QUÍMICA CIRCUNESTELAR

Tanto la interacción de los nuevos vientos rápidos con el remanente de la envoltura AGB (generación de choques), como el incremento progresivo del campo de radiación procedente del objeto central (fotodisociación del interior de la CSE), sugiere que las PPNe sufren una evolución química. Las condiciones físicas que inducen estos nuevos mecanismos hacen que el contenido molecular y los procesos químicos dominantes puedan variar sustancialmente respecto a la fase AGB. Sin embargo, el conocimiento que se tiene sobre la evolución química ha sido mucho menos estudiado. Esto se debe a la corta duración de la fase de PPNe y a que la mayoría de los cambios se producen en el interior de la CSE donde tanto la temperatura como la densidad del gas son elevadas. Estas condiciones provocan la excitación de niveles vibracionales moleculares (IR-medio y -cercano) y la población de niveles rotacionales de  $J$ -alto (IR-lejano), así como la aparición de líneas de estructura fina atómicas (IR-lejano), que no pueden observarse satisfactoriamente desde telescopios terrestres. Sólo con la puesta en órbita de *ISO* se ha podido analizar por primera vez el rango espectral continuo entre  $\sim 2$  y  $\sim 197 \mu\text{m}$ , que permite trazar las regiones internas de la CSE donde se producen los cambios más significativos de la fase PPNe.

En el caso de IRC+10216, el arquetipo de estrella AGB carbonada, la emisión en el IR-lejano está dominada por las especies más estables de la CSE; CO y HCN. En el IR-medio domina la absorción de  $\text{C}_2\text{H}_2$ , mientras que el espectro milimétrico está dominado por los radicales  $\text{C}_n\text{H}$ . Dada la expectación provocada por la posibilidad de que las envolturas AGB pudieran ser el lugar de formación de moléculas ricas en carbono más complejas (como los PAHs) responsables de las *bandas IR sin identificar* (UIBs) y de las *bandas difusas interestelares* (DIBs), estos resultados fueron ciertamente frustrantes. Sin embargo, las observaciones procedentes de *ISO* y de telescopios milimétricos (CAP. 7 y CAP. 8) han mostrado que la situación cambia radicalmente en la fase de PPNe con la aparición del campo de radiación UV y los choques que se producen en la interacción de los vientos AGB y post-AGB.

En particular, destaca la detección de poliinos ( $\text{C}_n\text{H}_2$ ), cianopoliinos ( $\text{HC}_{2n+1}\text{N}$ ), cumulenos ( $\text{C}_n$ ), metil-poliinos ( $\text{CH}_3\text{-C}_n\text{H}$ ), y sobre todo, la detección del benceno ( $\text{C}_6\text{H}_6$ ), la unidad aromática fundamental (Cernicharo *et al.* 2001a y b). La detección del benceno simboliza el punto de partida de una astroquímica que no se basa únicamente en cadenas lineales de carbono y que permite la formación de estructuras policíclicas mucho más complejas.

Todavía no se han podido integrar las abundancias de las especies observadas en un modelo químico que explique la riqueza de las PPNe ricas en carbono. De momento se sabe que la polimerización de algunas especies clave como el  $\text{C}_2\text{H}_2$  (Cernicharo *et al.* 2001a y b), y todo el conjunto de reacciones químicas inducidas por la radiación UV hacen de las PPNe las mayores factorías de moléculas orgánicas del universo. Además, se espera que el incremento de la  $T_{\text{ef}}$  de las estrellas centrales haga que el campo de radiación UV sea cada vez más intenso y el interior de la CSE transforme su contenido molecular en gas atómico de baja excitación. Los estudios de las líneas de estructura fina en el IR-lejano muestran que la aparición de esta emisión atómica en PPNe ocurre cuando  $T_{\text{ef}} > 10000 \text{ K}$  (FIG. 6.3; Fong *et al.* 2001; Castro-Carrizo *et al.* 2001).

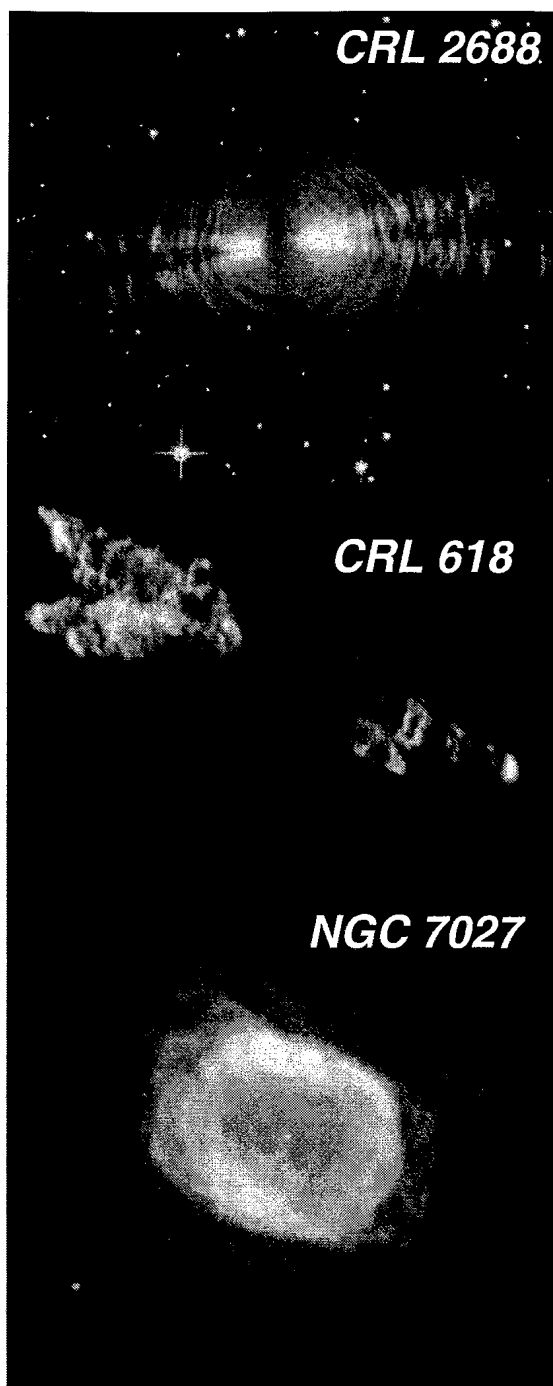


FIGURA 6.2: Imágenes tomadas con el HST de las CSEs a estudiar en el próximo capítulo. **Superior:** Observaciones de CRL 2688 en el visible empleando tres filtros para diferentes polarizaciones (coloreados en rojo, azul y verde). El tamaño de la imagen es de  $86''$  (The Hubble Heritage Team 2003). **Medio:** Observaciones de CRL 618 en la que los falsos colores simbolizan: azufre ionizado (rojo), hidrógeno neutro (verde), oxígeno neutro (azul-verdoso), continuo (azul). La extensión angular total de la nebulosa es de  $12''$  (ESA & A.G.G.M Tielens 2000). **Inferior:** Observaciones de NGC 7027 a 1.10, 2.12 y 2.15  $\mu\text{m}$ . El color rojo es sensible a la emisión de  $\text{H}_2$  y el color blanco al gas ionizado. El tamaño angular es de  $\sim 15''$ . (Latter et al. 2000).

A continuación se resumen las **características** de una **PPNe**:

- Son fuentes en el IR-lejano debido a la absorción y remisión de fotones fotosféricos por el polvo de la CSE. Se observa emisión molecular procedente de la CSE AGB remanente. Parte del material comienza a ser reprocesado por el campo de radiación en aumento procedente del objeto central. El contenido molecular de la CSE se modifica considerablemente, pero el conocimiento que se tiene sobre la evolución química en la fase PPNe es limitado.
- Las temperaturas efectivas de las estrellas centrales aumentan con la contracción de las regiones convectivas de la envoltura estelar y con la combustión en las capas de H. Están comprendidas entre los  $\sim 3000$  K de una estrella AGB y los  $\sim 100000$  K de los objetos centrales de las PNe. A partir de  $T_{ef} > 10000$  K se observan líneas de estructura fina en el IR-lejano procedentes del interior fotodisociado de la CSE.
- $\dot{M}$  disminuye notablemente desde la fase AGB. La CSE se separa definitivamente de la fotosfera. Observacionalmente esto da lugar a distribuciones espectrales de energía con dos picos (fotosfera + polvo CSE). La dilución geométrica de CSE hace que la temperatura de color sea intermedia entre la de una estrella AGB y una PNe.
- Se desarrollan vientos de alta velocidad ( $\sim 200 \text{ km s}^{-1}$ ) observables en la emisión CO, cuya interacción con el remanente AGB acelera el gas con simetrías generalmente bipolares. El origen y excitación de estos vientos post-AGB es todavía confuso.

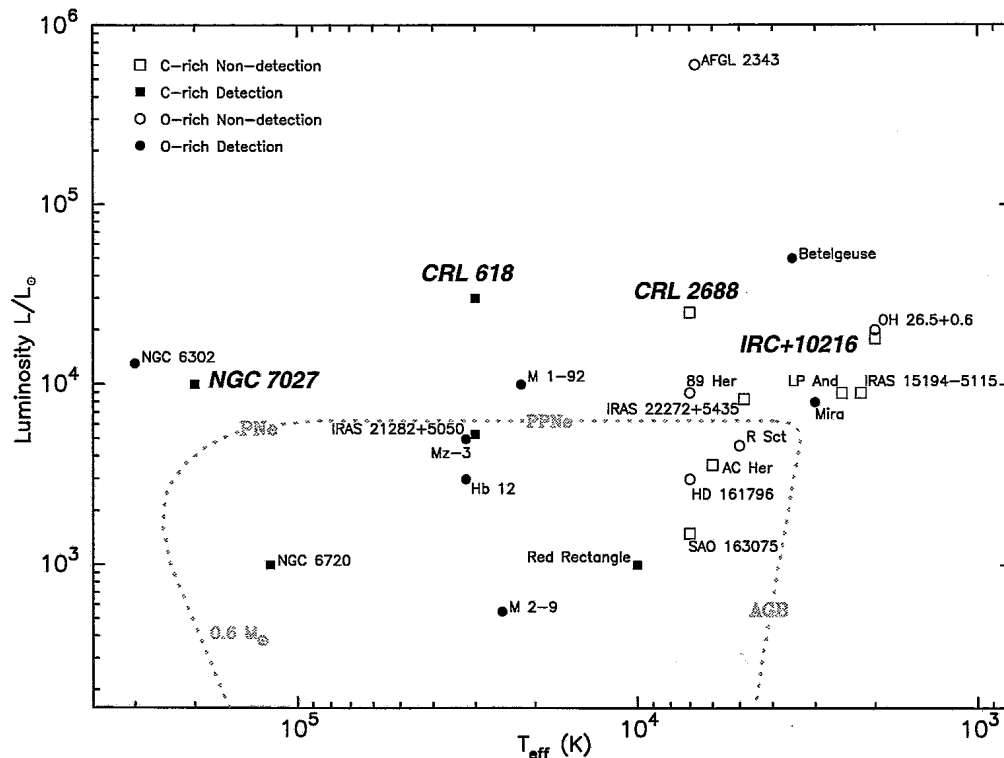


FIGURA 6.3: Distribución en un diagrama H-R de CSEs de estrellas post-AGB observadas por ISO. Se resalta la posición de los objetos que serán estudiados en el próximo capítulo (IRC+10216, CRL 2688, CRL 618 y NGC 7027). Los polígonos rellenos indican la detección de alguna línea de estructura fina en el IR-lejano. Adaptada de Castro-Carrizo et al. (2001).

## Capítulo 7

# Evolución Química de PPNe carbonadas

En este capítulo se analiza por primera vez el espectro en el IR-lejano de varias envolturas circunestelares (CSEs) ricas en carbono con las que se pretende trazar la transición desde el final de la fase AGB hasta la fase de PNe. El objetivo principal es determinar las variaciones más importantes en la evolución química de estas envolturas durante la corta etapa de PPNe. Las características químicas están determinadas por las variaciones en el contenido molecular de las CSEs así como por los procesos físicos dominantes (vientos, fotodisociación y nuevos procesos químicos). El trabajo aquí presentado muestra las contribuciones pioneras de las observaciones en el IR-lejano a este propósito. La caracterización completa de los mecanismos físicos y químicos que operan durante esta transición es una tarea altamente compleja e irá siendo desvelada con el refinamiento de los modelos químicos y con la mejora de la resolución espacial/espectral de las observaciones en el IR-lejano y en la región submilimétrica. Como se verá en los dos próximos capítulos, las condiciones fisicoquímicas de las PPNe se modifican considerablemente respecto a etapas evolutivas anteriores, dando lugar a cambios muy significativos en la composición química del gas circunestelar. Los objetos seleccionados para el estudio son: CRL 2688 (una PPNe joven), CRL 618 (una PPNe) y NGC 7027 (una PNe joven).

### 7.1 INTRODUCCIÓN

En la fase de gigantes rojas, las estrellas de baja masa desarrollan una envoltura de gas a su alrededor. Las condiciones físicas en las regiones fotosféricas (1500-2000 K) de la estrella son adecuadas para la formación de especies moleculares. Algunas de estas especies son refractarias (Si, Fe, Mn) y tienen tendencia a formar agregados que convierten en núcleos de condensación donde otras moléculas pueden depositarse. Cuando la presión de radiación empieza a producir una aceleración en esos pequeños granos de polvo, el gas cercano también es arrastrado. Al descender la temperatura de la envoltura a 800-1000 K, una buena fracción de las moléculas se depositan sobre los granos de polvo produciendo un importante incremento tanto de su tamaño como de la presión de radiación que se ejerce sobre ellos. Unido a la pérdida de masa dominada por las pulsaciones estelares, se genera una velocidad suficiente para que el gas escape a la atracción gravitatoria de la estrella. La envoltura circunestelar de gas molecular y polvo se ha formado y comienza su lenta expansión.



Las estrellas de tipo solar permanecen en la fase AGB durante  $10^6$ – $10^7$  años. Las pérdidas de masa en esta etapa ( $\dot{M} \sim 10^{-7}$ – $10^{-4} M_{\odot}$ /año) están producidas por la presencia de vientos estelares con velocidades de  $\sim 5$ – $25 \text{ km s}^{-1}$  (*p.ej.*, Loup *et al.* 1993). El material eyectado durante esta fase crea la CSE esférica. El campo de radiación UV procedente del ISM provoca la fotodisociación de las moléculas en las regiones más externas de la CSE lo que permite la formación de diferentes especies moleculares a partir de nuevas reacciones químicas. Los cambios químicos asociados a la fase AGB han sido muy estudiados a través de modelos teóricos y de multitud de observaciones en el caso de IRC +10216, el prototipo de estrella AGB carbonada (Glassgold 1996; Cernicharo *et al.* 2000b). El contenido molecular de las CSEs comienza a transformarse cuando terminan la etapa de AGB y las estrellas centrales comienzan a evolucionar hacia la fase de enana azul. La región interior de la CSE comienza a ser iluminada por un campo de radiación UV provocado por el aumento progresivo de la temperatura efectiva de la estrella central. Del interior de la envoltura surgen simultáneamente los denominados vientos de alta velocidad que interactúan con el remanente de la envoltura AGB (Kwok 2000).

Durante esta fase de PPNe (1000–2000 años; Bujarrabal *et al.* 2001), la simetría esférica característica de las CSEs en la fase AGB es remplazada por otras estructuras geométricas más complicadas (la mayoría de las envolturas de las PPNe son elípticas, bipolares o cuadrupolares; Zuckerman & Aller 1986; Frank *et al.* 1993). La composición química de la CSEs estará determinada por la aparición de estos nuevos procesos. Algunos de los cambios más significativos que se conocen son la formación de moléculas oxigenadas en PPNe ricas en carbono (Herpin & Cernicharo 2000) y la producción eficiente de moléculas orgánicas complejas como el benceno que no se observan en IRC+10216 (Cernicharo *et al.* 2001a, 2001b).

Para profundizar en la comprensión de la evolución química de las CSEs de objetos post-AGB ricos en carbono, a continuación se presenta un estudio comparativo de la emisión rotacional de CO en las regiones milimétrica (IRAM 30-m), submilimétrica (CSO) e IR-lejano (ISO). Como se ha dicho anteriormente, los tres objetos seleccionados (CRL 2688, CRL 618 y NGC 7027) representan tres estados evolutivos diferentes de la fase PPNe. Aquí se analizará y modelará en detalle el espectro en el IR-lejano de cada uno de ellos. Las diferentes condiciones de excitación observadas en las líneas de CO permiten ir trazando diferentes regiones de la CSE. En particular se ha puesto especial énfasis en el estudio del viento remanente AGB de baja velocidad y en los vientos de alta velocidad responsables de los cambios de morfología en la CSE (probablemente ausentes durante la fase AGB). Complementariamente a este estudio se ha realizado por primera vez un *survey* espectral completo de CRL 618 en las longitudes de onda  $\lambda=3$ , 2 y 1 mm con los radio telescopios terrestres IRAM 30-m y CSO. Este trabajo ha permitido identificar todas las moléculas polares abundantes en su CSE.

La estructura del capítulo es como sigue. En la SEC. 7.2 se presentan las observaciones realizadas con los tres telescopios. En la SEC. 7.3 se discute la representatividad de cada fuente seleccionada y en la SEC. 7.4 se analiza el espectro de IRC+10216 como representante de la emisión de una CSE en el estado evolutivo anterior al de PPNe. En las SECS. 7.5, 7.6 y 7.7 se estudian individualmente CRL 2688, CRL 618 y NGC 7027 respectivamente. Los resultados más importantes del *survey* espectral de CRL 618 se presentan en la SEC. 7.6.3. Finalmente, en la SEC. 7.8 se realiza una discusión global basada en la comparación de las cuatro CSEs.

## 7.2 OBSERVACIONES Y ANÁLISIS DE LOS DATOS

### OBSERVACIONES MILIMÉTRICAS Y SUBMILIMÉTRICAS

Las líneas de CO  $J=1-0$  y  $J=2-1$  fueron observadas en Septiembre de 2000 con el radiotelescopio IRAM-30m utilizando cuatro receptores SIS. El apuntado y focalizado fue comprobado cada cierto tiempo observando la emisión de continuo de Saturno y Júpiter. La incertidumbre en el apuntado de las observaciones es de  $\sim 2''$ . Las temperaturas de sistema fueron de 250 K (CO  $J=1-0$ ) y 400 K (CO  $J=2-0$ ). Se empleó el modo de observación *wobbler switching* que proporciona líneas de base muy planas. Como espectrómetros se utilizaron un banco de filtros (a 115 GHz) y un autocorrelador (a 230 GHz) que cubren una banda aproximada de 512 MHz con resoluciones en frecuencia de 1 y 1.25 MHz ( $2.60$  y  $1.63 \text{ km s}^{-1}$ ) respectivamente.

Las líneas de CO  $J=3-2$ ,  $4-3$ ,  $6-5$  y  $7-6$  fueron observadas entre Septiembre y Octubre de 2000 con el radiotelescopio CSO de 10.4m en Mauna Kea (Hawaii). Las temperaturas típicas de sistema fueron de 750 K (CO  $J=3-2$ ) y 5000-6000 K para el resto. Se utilizaron dos espectrómetros acusto-ópticos. Uno de ellos cubría un ancho de banda de 500 MHz en 1024 canales y el otro cubría 1.5 GHz en 2048 canales proporcionando respectivamente una resolución espectral (en  $\text{km s}^{-1}$ ) de  $146.38/\nu$  y  $219.57/\nu$  con  $\nu$  en GHz. Para más detalles sobre los receptores empleados véase Kooi *et al.* (2000) y referencias en el citadas.

Algunas de las observaciones con CSO fueron realizadas poco tiempo después de la instalación de nuevos receptores operando entre 790 y 920 GHz. El apuntado y focalizado había sido previamente determinado durante algunas observaciones anteriores en el mismo año. Durante las propias observaciones de CO también se comprobaron utilizando el continuo de Júpiter y Saturno y la propia emisión de CO en cada objeto. Teniendo en cuenta que la emisión de CO en estas envolturas es extensa, se considera que la incertidumbre en el apuntado es de  $\sim 4''$  (CO  $J=3-2$  y  $4-3$ ) y  $\sim 2''$  (CO  $J=6-5$  y  $7-6$ ). Las observaciones también se realizaron en el modo *wobbler switching* variando la posición del reflector secundario en  $60''$ .

Para la discusión comparativa de este trabajo se realizaron ajustes de los espectros de CO en milimétricas y submilimétricas (FIG. 7.1) para determinar la velocidad de las diferentes componentes y el cociente ( $R_I$ ) de intensidades integradas entre la emisión del remanente AGB y la del viento de alta velocidad en cada transición de CO. Puesto que la resolución angular de las observaciones varía dependiendo de la frecuencia de cada línea y del telescopio empleado, la contribución relativa a la emisión detectada en el remanente AGB (extenso) y en los vientos de alta velocidad (no resueltos) son diferentes. Por lo tanto,  $R_I$  traza la excitación de la emisión CO en las diferentes componentes de cada objeto estudiado (véase las TABLAS 7.1, 7.3 y 7.8).

### OBSERVACIONES EN EL IR-LEJANO CON ISO

Las observaciones ISO/LWS ( $43-196.7 \mu\text{m}$ ) en el modo LWS L01 de cada objeto tienen una resolución espectral de  $0.29 \mu\text{m}$  para los primeros cinco detectores en el rango  $43-93 \mu\text{m}$  y de  $0.6 \mu\text{m}$  para los cinco últimos detectores en el rango  $80-196 \mu\text{m}$ . Los TDTs que identifican las observaciones de CRL 2688 y CRL 618 son: 02101504 y 68800302+68800450 respectivamente. Los tiempos de integración totales para cada fuente fueron 1218 y 5360 segundos respectivamente. La línea HCN  $J=18-17$  en CRL 618 fue detectada en el modo LWS L02 (TDT 15401320) con un tiempo de integración de 914 segundos (véase la FIG. 7.3). Finalmente, se presenta una reducción de todas las observaciones realizadas con ISO en el modo LWS L01 de NGC 7027.

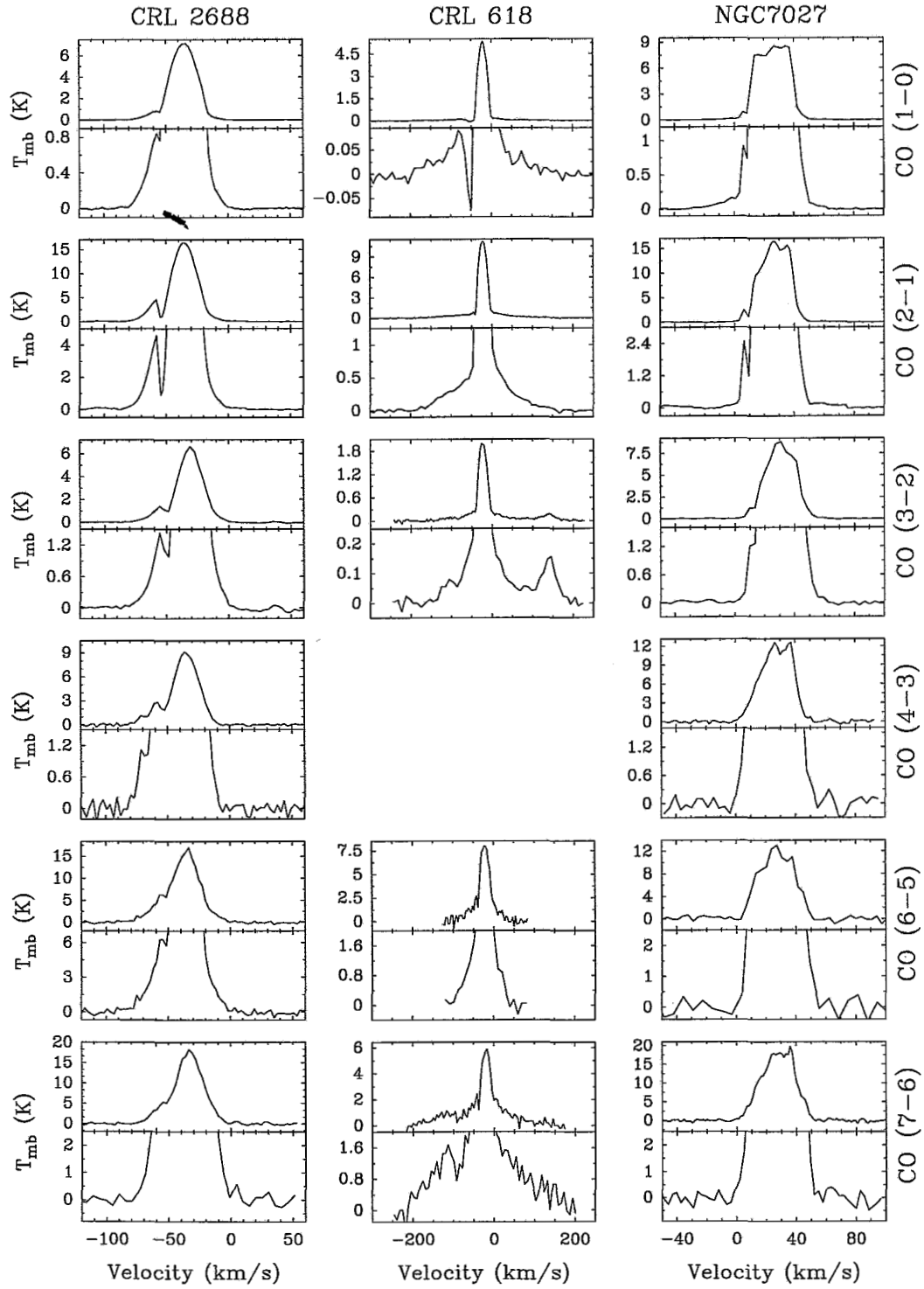


FIGURA 7.1: Observaciones de las líneas CO  $J=1-0$ ,  $2-1$ ,  $3-2$ ,  $4-3$ ,  $6-5$  y  $7-6$  en CRL 2688, CRL 618 (sin observaciones  $J=4-3$ ) y NGC 7027. El eje de las ordenadas está en temperaturas main beam (K) y las abscisas en  $\text{km s}^{-1}$ . A los espectros se les ha sustraído una línea de base y se les ha suavizado. Las líneas CO  $J=1-0$ ,  $2-1$  son observaciones con IRAM-30m y el resto con el CSO. Para cada línea el panel superior muestra el perfil de la línea completo mientras que el panel inferior muestra con más detalle la emisión a alta velocidad. La emisión a  $141 \text{ km s}^{-1}$  en la línea  $J=3-2$  de CRL 618 corresponde a la línea  $\text{HC}_3\text{N } J=38-37$ . Los factores de conversión en janskys/K son 4.3 y 4.2 para las transiciones  $J=1-0$  y  $2-1$ , y 40 para el resto de las líneas.

Los TDTs que de las observaciones son: 72700606, 36302702, 37701104, 74801715, 35601504, 02101201, 76200804, 72001111, 71300611, 70601207, 76902705, 34900704, 34201604, 78301603, 77602603, 55903201, 55205801, 60101507, 56600604, 57302901, 59402805, 58702607, 57902801, 74102906 y 73400804. El tiempo total de integración es de 53409 segundos.

Las observaciones de CO con ISO/LWS en el modo Fabry-Perot (con una resolución de  $\sim 35 \text{ km s}^{-1}$ ) en CRL 2688 se identifican con los TDTs 36601102 y 36901703. Los tiempos de integración para cada observación fueron de 3400 y 5800 segundos respectivamente. Todos los productos LWS han sido procesados con las versiones del OLP 9.0 del archivo. El análisis se realizó interactivamente con ISAP.

### 7.3 REPRESENTATIVIDAD DE LA MUESTRA

En las próximas secciones se intentará identificar y discutir los cambios que ocurren en la transición de las AGB carbonadas hacia la fase de PNe. El objetivo de este trabajo es trazar la química circunestelar en la evolución post-AGB. El estudio está basado en el análisis de las diferencias espectrales observadas en IRC+10216, CRL 2688, CRL 618 y NGC 7027. Por lo tanto se va a *asumir* que IRC+10216 se convertirá en un objeto parecido a CRL 2688, y luego en un objeto similar a CRL 618, que finalmente evolucionará convirtiéndose en una PNe parecida a NGC 7027. El procedimiento ideal, pero irrealizable, sería la observación de la evolución post-AGB de un único objeto. Además, la muestra de objetos seleccionados deberían ser "típicos" en el sentido de que cada uno de ellos tiene que representar las características promedio de la mayoría de objetos en el mismo estado de evolución. Sin embargo, CRL 2688, CRL 618 y NGC 7027 son objetos *inusuales* en algunas propiedades particulares y pueden considerarse como casos extremos dentro de los objetos post-AGB ricos en carbono.

Efectivamente, los cuatro objetos seleccionados emiten intensamente en líneas moleculares, pero mientras IRC +10216 es una fuente relativamente cercana (110–150 pc; *p.ej.*, Groenewegen *et al.* 1998; Crosas & Menten 1997), los otros tres objetos son 5–10 veces más lejanos (Acker *et al.* 1992; Bujarrabal *et al.* 1994; Sahai *et al.* 1998). Puesto que la distancia puede influir en los flujos medidos y en el perfil de las líneas, esta diferencia podría dificultar la comparación entre IRC+1026 y el resto de las fuentes.

Los trabajos más recientes estiman en  $\leq 2 M_{\odot}$  la masa de la estrella progenitora de IRC+10216 mientras que la masa actual de su núcleo estelar es de  $\sim 0.6 M_{\odot}$  (Kahane *et al.* 2000). Los cálculos teóricos muestran sin embargo una masa de  $\sim 3 M_{\odot}$  para las estrellas progenitoras de CRL 2688 y CRL 618 (Speck, Meixner & Knapp 2000) y de 3–4  $M_{\odot}$  para la estrella progenitora de NGC 7027 (Bernard Salas *et al.* 2001). Estos parámetros indican que IRC+10216 evolucionará más lentamente que las otras fuentes hacia la fase de PNe y esto puede afectar a la química de su CSE (*p.ej.*, aumentando el tiempo de vida media de las especies radicales). Sin embargo hay que subrayar que existen diversos paralelismos entre todas las CSEs de la muestra: son muy densas, ópticamente espesas, enrojecidas por la presencia de polvo, y estructura de densidad en forma de capas observada como arcos incompletos (Men'shchikov *et al.* 2001; Maun & Huggins 1999). Estos arcos circunestelares concéntricos son extremadamente pronunciados en IRC+10216 y también se detectan en NGC 7027 (Kwok, Su & Stoesz 2001) y CRL 2688 (Maun 1997). Otros autores han propuesto de forma más general que la futura evolución de CRL 2688 dará morfologías similares a las observadas en NGC 7027 (especialmente en la nebulosa ionizada y en la región  $H_2$ ; Cox *et al.* 1997).

CRL 2688 es anómala espectralmente si se compara con otros objetos carbonados post-AGB. En particular, su espectro IR es muy diferente respecto al de cualquier de otro objeto post-AGB ya que su emisión es ópticamente espesa incluso a  $30\ \mu\text{m}$  (Omont *et al.* 1995).

CRL 618 y CRL 2688 se parecen en que los dos objetos tienen envolturas moleculares muy masivas y flujos bipolares centrales (Meixner *et al.* 2001). Sin embargo, CRL 618 muestra una inusual riqueza en su química circunestelar que puede estar relacionada con su avanzado estado de evolución (Herpin & Cernicharo 2000).

NGC 7027 es inusual respecto a otras PNe debido a la masiva envoltura molecular que rodea la región ionizada. La PDR situada entre las dos regiones es una de las más calientes y densas de la muestra estudiada por Liu *et al.* (2001). De hecho, la región ionizada de NGC 7027 se caracteriza por ser de menor masa ( $\leq 0.2\ M_{\odot}$ ) que la de otras PNe típicas ( $0.3\text{--}0.5\ M_{\odot}$ ), mientras que su envoltura molecular externa alcanza las  $2\text{--}4\ M_{\odot}$ .

Las fuentes seleccionadas son peculiares respecto a algunas de sus propiedades que pueden influir en su evolución post-AGB. Sin embargo, el estudio comparativo de sus envolturas moleculares puede ayudar a identificar los distintos esquemas químicos inducidos por los cambios físicos que van sucediendo en la fase de PNe. Este es el objetivo del capítulo.

## 7.4 IRC+10216: PROTOTIPO DE AGB CARBONADA

Antes de analizar la emisión en el IR-lejano durante la fase PNe, resulta conveniente resumir las principales características de un objeto típico al final de la fase AGB. IRC+10216/CW Leo es la estrella AGB carbonada más brillante de la galaxia y una de las más próximas a la tierra (Groenewegen *et al.* 1998; Crosas & Menten 1997). Se piensa que en su fotosfera estelar han tenido lugar varios pulsos térmicos que indican que efectivamente el objeto está llegando al final de la rama AGB. Después de un periodo de unos  $10^5$  años de intensas pérdidas de masa con ritmos  $\dot{M} \simeq (2\text{--}5) \cdot 10^{-5} M_{\odot} \text{ año}^{-1}$ , la fotosfera estelar ha sido expelida casi en su totalidad en forma de densa CSE de gas molecular y polvo.

La temperatura efectiva de la estrella central es 2000 K y la velocidad terminal de la CSE a su alrededor es de  $14.5\ \text{km s}^{-1}$  (Skinner, Meixner & Bobrowsky 1998). En la extensa CSE de IRC+10216 se han detectado más de 53 especies moleculares (veanse los *surveys* espectrales de Cernicharo *et al.* 1996b, 2000b). La química de la CSE es rica en carbono y la mayoría de las especies detectadas son radicales de carbono lineales ( $\text{C}_5\text{H}$ ,  $\text{C}_6\text{H}$ ,  $\text{C}_8\text{H}$ ,  $\text{H}_2\text{C}_3$ ,  $\text{H}_2\text{C}_4$ , ...) que con otras como SiC, SiC<sub>2</sub> o MgNC son producidas eficientemente en las capas más externas de la CSE ( $\sim 15''$ ,  $r \geq 100\ R_{\star}$ ), donde la química está dominada por reacciones neutro-neutro e ión-molécula. La química en las regiones externas de la CSE se explica dentro de un modelo *fotoquímico* (Glassgold 1996) donde los fotones UV del ISM penetran la envoltura provocando la fotodisociación de las especies más abundantes y la formación de radicales moleculares muy reactivos. En el interior de la CSE ( $\sim 6''$ ), las temperaturas y densidades son mucho más altas y el valor exacto depende fuertemente de la distancia a la estrella central. En las regiones internas se forman las especies más abundantes y con enlaces moleculares más estables de la CSE ( $\text{CO}$ ,  $\text{HCN}$ , y  $\text{C}_2\text{H}_2$ ) dominadas por una química en *equilibrio termodinámico* (Tsuji 1973). En estas regiones también se encuentran sales metálicas ( $\text{NaCl}$ ,  $\text{AlCl}$  y  $\text{KCl}$ ; Cernicharo & Guélin 1987) y moléculas ricas en silicio ( $\text{SiO}$ ,  $\text{SiS}$ , ...). En las regiones donde se condensa el polvo ( $r = 4\text{--}10\ R_{\star}$ ) dominan las reacciones químicas en la superficie de los granos de polvo.

El espectro en el IR-lejano de IRC+10216 (véase FIG. 7.12) está dominado por la emisión térmica del polvo y la emisión de líneas moleculares. En particular se observan las líneas rotacionales en el estado vibracional fundamental de  $^{12}\text{CO}$  ( $J=14-13$  a  $J=39-38$ ),  $\text{H}^{12}\text{CN}$  ( $J=18-17$  a  $J=48-47$ ), así como líneas de las variantes isotópicas  $^{13}\text{CO}$  y  $\text{H}^{13}\text{CN}$ . Finalmente se detectan líneas de HCN en estados vibracionales excitados (sólo poblados en el gas caliente  $r < 50 R_*$ ). Estas detecciones ponen de manifiesto la importancia de realizar observaciones de CSEs en el IR-lejano. La elevada energía de los niveles moleculares involucrados hace que se puedan trazar las regiones más internas y calientes de las CSEs, mientras que los estudios milimétricos y submilimétricos trazan las regiones más frías y externas. Las líneas de CO y HCN en IRC+10216 tienen intensidades similares, su análisis detallado muestra un cociente de abundancias  $\text{HCN}/\text{CO} = 1/10$  y a unas luminosidades en el IR-lejano ( $\lambda > 70 \mu\text{m}$ ) de  $L_{\text{HCN}} = 0.44 L_{\odot}$  y  $L_{\text{CO}} = 0.28 L_{\odot}$ . Estos resultados demuestran que HCN es el refrigerador más importante en esta CSE rica en carbono, jugando un papel similar al del agua en las CSEs oxigenadas. Únicamente se ha detectado el ion  $\text{HCO}^+$  (Lucas & Guélin 1999) y tampoco hay emisión de [CII] a  $158 \mu\text{m}$  ni de ninguna otra línea de estructura fina. Esto es consistente con la baja temperatura efectiva de la estrella central y la ausencia de fotodisociación en el interior de la CSE. Las observaciones en el IR-medio y -cercano muestran que el espectro está dominado por la absorción rovibracional de  $\text{C}_2\text{H}_2$  y HCN (Cernicharo *et al.* 1999).

IRC+10216 está abandonando la fase AGB. Desde este punto evolutivo, la contracción de las regiones fotosféricas y el aumento de la temperatura efectiva de la estrella central harán que en un diagrama  $H-R$ , su posición se desplace horizontalmente a la región poblada por las PPNe (FIG. 6.3). En esta fase transitoria aparecen nuevos fenómenos físicos que modificarán considerablemente el contenido molecular de la CSE. El gas circunestelar empezará a someterse a un intenso campo de radiación UV interior generado por la estrella central. Simultáneamente, los nuevos y rápidos vientos que se forman durante esta fase producirán frentes de choque en su interacción con la envoltura AGB remanente que se expande lentamente. La importancia de estos mecanismos depende del grado de evolución de la PPNe. A continuación se analiza la emisión en el IR-lejano de algunas de las PPNe más representativas.

## 7.5 CRL 2688: UNA PPNe JOVEN

CRL 2688 (*Egg Nebula*) es una PPNe muy joven. La temperatura efectiva de su estrella central ha aumentado notablemente ( $T_{\text{ef}} = 6600 \text{ K}$ ) desde la etapa anterior. Su tipo espectral es  $F5 \text{ Ia}$  (Justtanont *et al.* 1997). Este objeto ha abandonado recientemente la fase AGB (hace unos 100 años; Jura & Kroto 1990) y está evolucionando rápidamente hacia la fase de PNe. La no detección de las líneas de [CII] y [OI] (Cox *et al.* 1996) indica que debido a la baja temperatura central de la estrella central, el campo de radiación no es suficientemente intenso para fotodisociar el interior de la CSE. La distribución del gas molecular en la CSE se encuentra fragmentada en estructuras de cáscaras en expansión. Se piensa que los frentes de choque producidos por la aparición de vientos moleculares rápidos en el interior de la CSE son los responsables del calentamiento del gas molecular. La velocidad de expansión del remanente de envoltura AGB (viento principal) es de  $20 \text{ km s}^{-1}$ . La emisión de  $^{12}\text{CO}$  en la CSE alcanza una extensión angular de  $42''$ , mientras que la emisión de la variante  $^{13}\text{CO}$  es más débil y se extiende sólo hasta  $20''$  (Yamamura *et al.* 1996).

Además de este *viento principal* se ha detectado un *viento de moderada velocidad* ( $\sim 40 \text{ km s}^{-1}$ ) con una extensión angular de  $10''$  (Sahai *et al.* 1998) y otro *viento rápido* de sólo  $4''$  de extensión (Cox *et al.* 2000). Los mapas interferométricos de la línea CO ( $J=2-1$ ) en este último trabajo muestran dos direcciones diferentes para el gas que se aleja del objeto central a altas velocidades en forma de múltiples chorros colimados norte-sur y este-oeste. Estas direcciones coinciden con los máximos de emisión de  $\text{H}_2$  a  $2 \mu\text{m}$  que traza las regiones sometidas a frentes de choque (Sox *et al.* 1997)

### 7.5.1 LÍNEAS DE CO DE BAJA EXCITACIÓN

Los perfiles de las líneas de CO de baja excitación que se muestran en la FIG. 7.1 son característicos de la emisión ópticamente espesa de CO. Sin embargo, mientras que las líneas  $J=1-0$ ,  $2-1$  y  $3-2$  trazan la componente extensa del remanente AGB de CRL 2688, las transiciones de elevado número cuántico rotacional  $J$  son más sensibles al gas caliente de las regiones internas de la CSE de menor extensión angular y menor columna de densidad de CO. Esto hace que la opacidad de estas líneas en la CSE vaya disminuyendo y los perfiles emergentes también vayan modificándose.

A partir de las observaciones de CO en CRL 2688 y de los parámetros inferidos en la TABLA 7.1 se pueden distinguir los dos vientos principales de la CSE. El viento principal remanente de la CSE AGB está centrado a  $-35.4 \text{ km s}^{-1}$  y se expande con una velocidad alrededor de  $20 \text{ km s}^{-1}$  (en buen acuerdo con Young *et al.* 1992). El segundo viento se expande con una velocidad moderada,  $\sim 50 \text{ km s}^{-1}$ , y aparece centrado a  $-60 \text{ km s}^{-1}$ . La intensidad en la componente desplazada hacia el rojo del viento de velocidad moderada es menos intensa que su contrapartida en el azul. Este comportamiento se debe a la mayor absorción producida por el viento principal en el ala desplazada hacia el rojo del viento de moderada velocidad.

Todas las líneas de baja excitación de CO en CRL 2688 (FIG. 7.1) muestran una componente en absorción en la región desplazada hacia el azul (a  $-55 \text{ km s}^{-1}$ ) de la emisión, justo en la posición de la velocidad terminal del viento principal. Este efecto sugiere que la CSE remanente de la fase AGB absorbe parte de la emisión a alta velocidad del CO que proviene de las regiones internas de la CSE. Young *et al.* (1992) encontraron en espectros de muy alta resolución

TABLA 7.1: *Parámetros de los diferentes vientos en la CSE de CRL 2688.*

Línea de CO ( $J =$ )	$v_{\text{principal}}$ ( $\text{km s}^{-1}$ )	$v_{\text{alas}}$ ( $\text{km s}^{-1}$ )	$R_I$	$\Delta R_I$
1-0 .....	19.3	50.0	0.08	(0.01)
2-1 .....	20.0	52.0	0.08	(0.01)
3-2 .....	23.9	50.7	0.11	(0.01)
4-3 .....	24.1	40.3	0.16	(0.02)
6-5 .....	23.4	41.6	0.24	(0.02)
7-6 .....	23.3	33.3	0.24	(0.03)

La incertidumbre en  $v_{\text{principal}}$  y  $v_{\text{alas}}$  es  $0.3 \text{ km s}^{-1}$ .  $R_I$  es el cociente de intensidades integradas entre la emisión principal y la emisión en las alas de cada línea de CO.

de las líneas de más bajo  $J$  que la anchura en velocidades de la componente en absorción es de  $\sim 1 \text{ km s}^{-1}$ . El presente estudio observacional indica que esta anchura se mantiene en las líneas de CO  $J=7-6$  y  $6-5$ , demostrando que la microturbulencia en la CSE remanente es prácticamente constante e igual a  $\sim 1 \text{ km s}^{-1}$ . El cociente  $R_I$  varía entre 0.08 ( $J=1-0$ ) y 0.24 ( $J=7-6$ ) subrayando la importancia de la emisión del viento de moderada velocidad en las líneas de CO con  $J$ -intermedio. La dilución de la emisión de esta componente en el *haz* del telescopio varía con  $J$ . Además, las opacidades de las líneas de CO procedentes del viento principal y del viento de moderada velocidad también varía con  $J$ . Esto significa que por encima de una transición rotacional  $J_{\min}$ , la emisión del viento principal remanente de la fase AGB será menos intensa que la emisión del viento de moderada velocidad. Por tanto, las observaciones en el IR-lejano de líneas de alta excitación son especialmente necesarias para poder trazar la emisión de CO en el interior de la CSE.

### 7.5.2 LÍNEAS DE CO DE ALTA EXCITACIÓN

En esta sección se presentan algunas de las líneas rotacionales de alta excitación del monóxido de carbono detectadas con el LWS/FP. Esta es la primera vez que se observan líneas de CO ( $J$ -alto) con suficiente resolución espectral ( $\sim 35 \text{ km s}^{-1}$ ) como para poder obtener alguna información cinemática de las regiones emisoras. Hasta ahora, todos los estudios del CO se habían limitado a observaciones milimétricas de CO ( $J$ -bajo) que trazan las regiones más externas de las CSEs. Las líneas de CO en el IR-lejano involucran a números cuánticos rotacionales altos y trazan las regiones más internas de la envoltura (donde aparecen los vientos de mayor velocidad). Las líneas detectadas con el FP van desde la transición  $J=16-15$  a  $J=26-25$  (véase la FIG. 7.2 para las líneas  $J=16-15$ ,  $19-18$ ,  $24-23$  y  $26-25$ ). Los flujos observados fueron normalizados por el flujo del continuo y reescalados a los flujos obtenidos de cada línea con el *grating* (FIG. 7.5). Puesto que la opacidad y los mecanismos de excitación de estas transiciones son bastante similares, se han promediado todas las líneas de CO detectadas con el FP para obtener un mejor cociente señal/ruido de la emisión de CO de alta excitación. El espectro promediado (FIG. 7.2, *panel derecho*) de la emisión CO LWS/FP muestra un perfil mucho más ancho de lo que se podría esperar para la CSE remanente de la fase AGB y está centrado a  $-65 \text{ km s}^{-1}$ . Esto sugiere que la emisión de CO ( $J$ -alto) proviene exclusivamente del viento de moderada velocidad. Para estimar la emisión de CO de alta excitación procedente de la CSE AGB y del viento interior de moderada velocidad se han ajustado dos gaussianas al espectro promedio de CO LWS/FP. El espectro muestra dos componentes en emisión claramente diferenciadas. Una situada a una velocidad de  $-70 \pm 10 \text{ km s}^{-1}$  y otra a  $-35 \pm 10 \text{ km s}^{-1}$ . Teniendo en cuenta las incertidumbres en la calibración de la longitud de onda con el FP, estas velocidades corresponden respectivamente al viento de moderada velocidad y al viento principal remanente de la fase AGB. El mismo *panel derecho* en la FIG. 7.2 muestra las dos gaussianas del mejor ajuste y la predicción promediada de los modelos LVG discutidos en la siguiente sección. Obviamente se necesitan observaciones similares de mejor resolución espectral (*p.ej.*, con el instrumento HIFI a bordo del telescopio *Herschel*) para confirmar la presencia diferenciada de las dos componentes.

El espectro promedio no puede proporcionar información directa sobre la densidad de columna de CO. Para extraer este parámetro se ha ajustado la emisión de la línea  $J=16-15$  (línea con mejor cociente S/R) con dos componentes de velocidades idénticas a las derivadas del espectro promedio. Posteriormente se extendió el resultado al resto de las líneas (véase la FIG. 7.2, *panel izquierdo*). Respecto a las densidades de columna que se obtienen de los modelos



Fabry-Perot CO lines in CRL2688

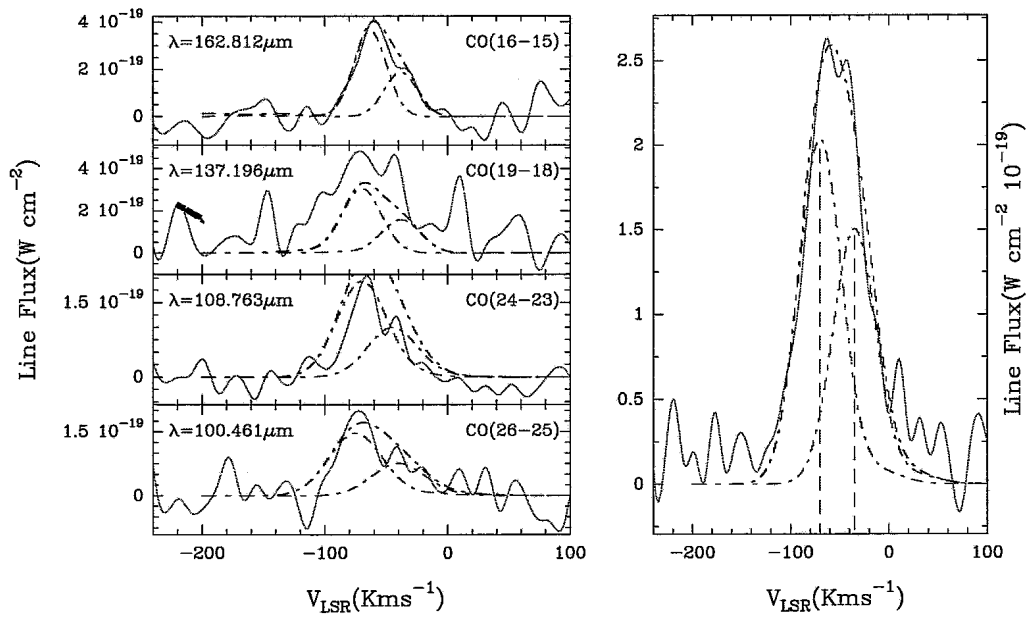


FIGURA 7.2: Observaciones LWS/FP de CO en CRL 2688 (izquierda) y promedio de todas las líneas observadas (derecha). La escala de intensidades corresponde esta reescalada a los flujos obtenidos en las observaciones grating de las mismas líneas. Las líneas a trazos representan los ajustes de los modelos LVG descritos en el texto (la precisión en velocidad es de  $\pm 15 \text{ km s}^{-1}$ ).

LVG para las líneas de CO con el *grating* (una componente no resuelta), la componente FP a  $-70 \pm 10 \text{ km s}^{-1}$  representa un 85% y la segunda componente a  $-35 \pm 10 \text{ km s}^{-1}$  representa un 45% de la densidad de columna de CO. Las observaciones LWS/FP de CO muestran que parte de la emisión (a  $-70 \pm 10 \text{ km s}^{-1}$ ) proviene de una región que se expande a una velocidad de  $\sim 40 \text{ km s}^{-1}$ . Puesto que este viento probablemente procede de la región de interacción con el remanente de envoltura AGB que se expande a menor velocidad, la alta densidad de columna de gas en las zonas sometidas a choques hace que esta componente aparezca sistemáticamente más intensa en todas las líneas de *J*-alto observadas con el FP.

La anchura de la componente a  $-35 \pm 10 \text{ km s}^{-1}$  (velocidad sistemática de la fuente) es consistente con las velocidades  $v_{\text{principal}}$  derivadas en la TABLA 7.1. En general, las anchuras en las líneas de *J*-alto muestran que la dispersión en velocidades es importante esta región.

### 7.5.3 EMISIÓN EN EL IR-LEJANO DE CRL 2688

Como se acaba de demostrar, las observaciones del gas en el IR-lejano permiten penetrar en las regiones más internas de la CSE, donde ocurren los cambios más importantes de la estructura de la CSE. El espectro de CRL 2688 (FIG. 7.5, *panel inferior*) muestra la emisión de las líneas rotacionales en el estado fundamental de  $^{12}\text{CO}$  ( $J=14-13$  a  $J=26-25$ ) y  $\text{H}^{12}\text{CN}$  ( $J=18-17$  a  $J=19-18$ ). La emisión de  $^{13}\text{CO}$ , si está presente en este espectro, es muy débil. La presencia de HCN de alta excitación en CRL 2688 viene confirmada por la detección de la línea  $J=18-17$  en el modo LWS L02 (FIG. 7.3). Nótese que algunas líneas de CO en el espectro *grating* (líneas  $J=19-18$ ,  $20-19$  y  $21-20$ ) muestran un perfil muy ancho debido probablemente al proceso de eliminación del patrón de interferencia observado en fuentes puntuales desviadas del eje óptico del telescopio ISO (Swinyard et al. 1996). Además, no se observan con el LWS/FP.

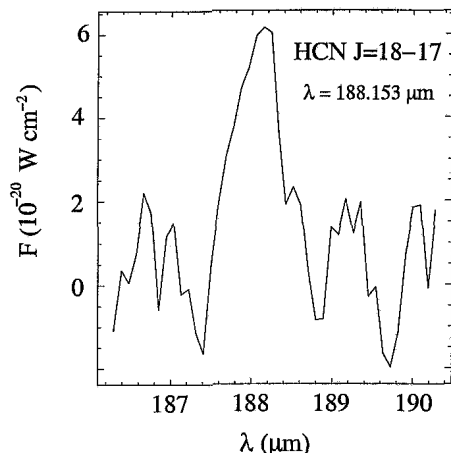


FIGURA 7.3: Detección de la HCN  $J=18-17$  en CRL 2688 en el modo de observación LWS L02 con una resolución de  $0.6 \mu\text{m}$  ( $S/R \sim 4$ ).

Con el propósito de realizar un modelo para la emisión en el IR-lejano de las tres fuentes seleccionadas se ha utilizado un modelo LVG en el que la CSE se divide en varias capas concéntricas de diferentes ángulos sólidos (definidos por el ángulo  $\theta$ ). En cada componente los parámetros libres son la densidad de columna de cada especie considerada, la densidad  $n(\text{H}_2)$  y la temperatura cinética. La abundancia real de cada especie dependerá de la profundidad geométrica de cada capa considerada, parámetro que no puede ser derivado en este esquema. Las suposiciones consideradas en el modelo pueden ser válidas para los vientos de alta velocidad y la PDR (en CRL 618 y NGC 7027) pero representan la aproximación más cruda en el remanente AGB porque se reduce a una sola capa con una única columna de densidad, temperatura y densidad. En la literatura existen algunos modelos detallados para la envoltura remanente AGB (*p.ej.*, Bujarrabal & Alcolea 1991). Para CRL 2688 primero se ha aplicado el modelo a la emisión de  $^{12}\text{CO}$  y se ha derivado la temperatura y densidad en cada capa. Posteriormente sólo se ha variado las densidades de columna de  $^{13}\text{CO}$  y HCN en cada capa (véase la TABLA 7.2). Las diferentes componentes de cada fuente considerada han sido seleccionados de trabajos teóricos y observacionales de la literatura y de nuestras observaciones milimétricas y submilimétricas (FIG. 7.1). Las temperaturas, ángulos sólidos, velocidades de expansión y densidades también fueron escogidos de estos trabajos. En algunas ocasiones se tuvo que adaptar alguno de estos parámetros para ajustar convenientemente las observaciones que aquí se presentan. La geometría particular adoptada para el modelo de CRL 2688 esta constituida por (FIG. 7.4):

- (i) Una región interna que simula el viento rápido detectado en los estudios de CO.
- (ii) Una región intermedia donde se sitúa el viento de moderada velocidad.
- (iii) El remanente de CSE AGB donde se produce la emisión principal de CO de baja excitación.

En este estudio se considera que las especies  $^{12}\text{CO}$ ,  $^{13}\text{CO}$  y  $\text{H}^{12}\text{CN}$  están presentes en todas las componentes. El gas es calentado fundamentalmente por los choques provocados por la interacción de los vientos y se enfría por medio de las líneas moleculares. Se piensa que los choques de tipo-C de baja velocidad ( $\sim 20 \text{ km s}^{-1}$ ) son incapaces de ionizar el carbono atómico y de disociar grandes cantidades de CO, pudiendo explicar la ausencia de las líneas  $[\text{CII}]158 \mu\text{m}$  y  $[\text{OI}]63 \mu\text{m}$  en el espectro en el IR-lejano de CRL 2688 (Justtanont *et al.* 2000).

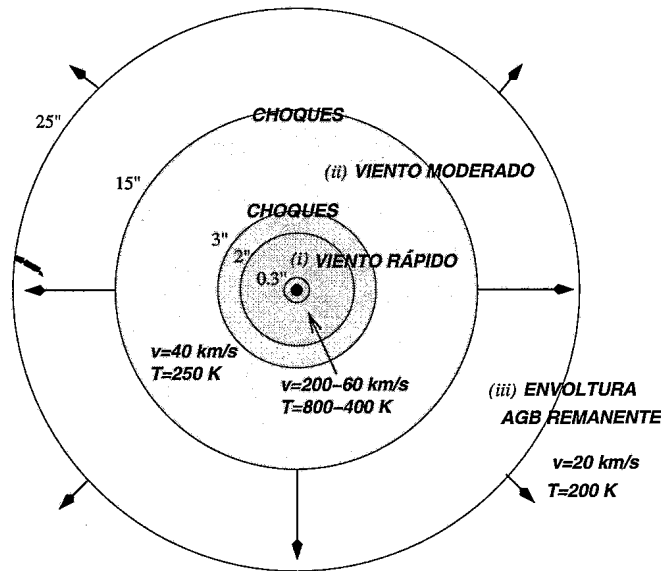


FIGURA 7.4: Esquema y parámetros utilizados en el modelo de CSE para CRL 2688.

La región interna (i) representa el viento de alta velocidad procedente de la fuente central (Sahai *et al.* 1998) y es simulado por una capa con  $\theta = 0.3''$ , una velocidad de expansión de  $200 \text{ km s}^{-1}$ , una temperatura de 800 K y una densidad de  $5 \times 10^7 \text{ cm}^{-3}$ . La mayoría de la emisión de CO a longitudes de onda cortas proviene de esta región. La densidad de columna derivada de  $^{12}\text{CO}$  es  $\sim 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-2}$  y las densidades de columna de  $^{13}\text{CO}$  y  $\text{H}^{12}\text{CN}$  respecto a  $^{12}\text{CO}$  son respectivamente  $< 1/25$  y  $< 1/100$ . Esta componente de gas caliente es necesaria para el ajuste correcto de las líneas de CO ( $J$ -alto) ya que una única componente de 400 K (véase el modelo de Cox *et al.* 1996) no reproduce los flujos de las líneas observadas. Puesto que este viento se decelera en su interacción con regiones más externas de la envoltura interna, se han considerado capas intermedias donde la velocidad de expansión va disminuyendo. La primera capa intermedia, con una extensión  $\theta = 2''$  y una temperatura de 500 K, se expande con una velocidad de  $100 \text{ km s}^{-1}$ . La densidad del gas sigue siendo la misma. Estos parámetros son similares a los utilizados por Cox *et al.* (1996; 2000). La densidad de columna de  $^{12}\text{CO}$  que se obtiene disminuye hasta  $7 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ , y el cociente de densidades de columna  $^{12}\text{CO}/\text{H}^{12}\text{CN}$  es menor que 1/30. La siguiente capa con  $\theta = 3''$ , tiene en cuenta la deceleración del viento de alta velocidad hasta  $60 \text{ km s}^{-1}$  y la disminución de la temperatura 400 K. La densidad de columna de  $^{12}\text{CO}$  es ahora  $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$  y los cocientes relativos  $^{12}\text{CO}/^{13}\text{CO}$  y  $^{12}\text{CO}/\text{H}^{12}\text{CN}$  son idénticos a la capa anterior.

La región (ii) simula el viento de moderada velocidad (Sahai *et al.* 1998) con una velocidad de expansión de  $40 \text{ km s}^{-1}$ , una temperatura de 250 K y una extensión angular dada por  $\theta = 15''$ . Para esta capa derivamos una densidad de columna de  $^{12}\text{CO}$  de  $4.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ , mientras que los cocientes relativos  $^{12}\text{CO}/^{13}\text{CO}$  y  $^{12}\text{CO}/\text{H}^{12}\text{CN}$  se mantienen iguales a los valores de las capas anteriores donde se forma el viento de alta velocidad.

Finalmente, el remanente de la envoltura AGB está representada por la región (iii), una capa extensa con  $\theta = 25''$ , temperatura típica de 50 K y densidad de  $10^6 \text{ cm}^{-3}$  que se expande a  $20 \text{ km s}^{-1}$ . La densidad de columna de  $^{12}\text{CO}$  derivada es  $3.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ .

El ajuste total de todas las componentes sobre las observaciones ISO/LWS se muestra en la FIG. 7.5. Simultáneamente se aplica el modelo a la emisión de CO ( $J$ -bajo) observada en milimétricas y submilimétricas (FIG. 7.1). Para un ajuste razonable de estas líneas sólo se necesitaron las componentes (ii) y (iii) del modelo. Las predicciones del modelo y los flujos observados para estas líneas se muestran en la TABLA 7.2.

TABLA 7.2: *Parámetros de los modelos LVG de CRL 2688 y densidades de columna.*

REGIÓN	T (K)	$\theta^a$ (arcsec)	$v$ (km s <sup>-1</sup> )	$n(H_2)$ (cm <sup>-3</sup> )	<sup>12</sup> CO (cm <sup>-2</sup> )	<sup>13</sup> CO (cm <sup>-2</sup> )	H <sup>12</sup> CN (cm <sup>-2</sup> )
Viento rápido (i)	800	0.3	200	$5 \times 10^7$	$2 \times 10^{18}$	$< 8 \times 10^{16}$	$< 2 \times 10^{16}$
	500	2	200	$5 \times 10^7$	$7 \times 10^{17}$	$< 2.8 \times 10^{16}$	$< 2.3 \times 10^{16}$
	400	3	60	$5 \times 10^7$	$5 \times 10^{17}$	$< 2 \times 10^{16}$	$< 1.7 \times 10^{16}$
Viento moderado (ii)	250	15	40	$5 \times 10^7$	$4.5 \times 10^{16}$	$< 1.8 \times 10^{15}$	$< 1.5 \times 10^{15}$
Remanente AGB (iii)	50	25	20	$5 \times 10^5$	$3.5 \times 10^{16}$	$< 1.4 \times 10^{15}$	$< 1.2 \times 10^{15}$

<sup>a</sup> ángulo sólido de cada capa considerada

#### 7.5.4 CAMBIOS DESDE LA ETAPA EVOLUTIVA ANTERIOR

Comparando el espectro en el IR-lejano de CRL 2688 con el de la etapa AGB anterior representado por IRC+10216, se puede observar que la emisión está dominada por las mismas moléculas pero con intensidades relativas diferentes. Esto se debe probablemente a que las regiones más internas de la envoltura remanente de la fase AGB ha comenzado a alejarse del objeto central ya en estas primeras etapas de evolución post-AGB. Esta es la causa de que las líneas rovibracionales de HCN hayan desaparecido del espectro de CRL 2688. No necesariamente por una drástica disminución de la abundancia de esta especie, si no porque la temperatura y densidad no es suficiente para la excitación de niveles vibracionales distintos del fundamental.

Debido a esto y a la ausencia de [CII] y [OI], la CSE se enfría principalmente a través de la emisión rotacional de CO y HCN. La evidencia observacional de que existen vientos más rápidos que en la fase AGB indica que el gas en las regiones internas de la CSE es ahora calentado mediante choques. En estas regiones choqueadas se favorece la emisión de CO de alta excitación. La elevada energía de los niveles rotacionales observados en el IR-lejano (hasta  $\simeq 2000$  K) hace que estén mucho menos poblados que los niveles de baja excitación (de opacidad muy elevada en el gas frío de la CSE AGB). La presencia en el IR-medio de especies moleculares como los poliinos (Cernicharo *et al.* 2001b) confirma que en la CSE de CRL 2688 ha comenzado una importante evolución química en comparación con IRC+10216. El viento rápido en la envoltura interna y el aumento del campo de radiación procedente del objeto central son el origen de la nueva química. Sus efectos empiezan a ser evidentes en CRL 2688. En el siguiente paso evolutivo representado por CRL 618 estos cambios transforman la química de la CSE.

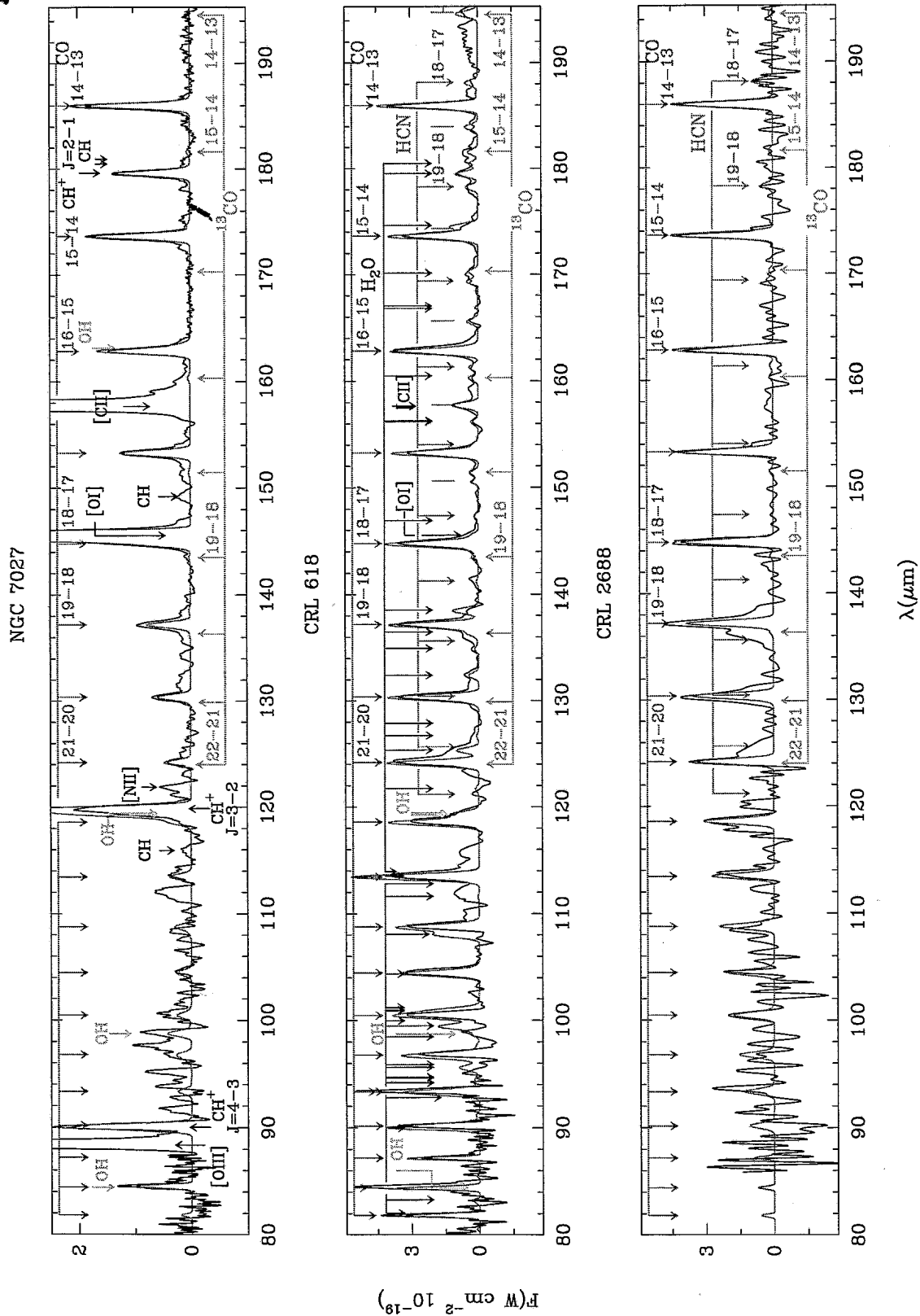


FIGURA 7.5: Espectros grating ISO/LWS de las PPNe CRL 2688 (inferior), CRL 618 (medio) y NGC 7027 (superior). Los resultados de los modelos LVG se muestran en rojo. Se indican con flechas las líneas de  $^{12}CO$ ,  $^{13}CO$ , HCN,  $H_2O$ ,  $CH^+$  y OH. Las líneas de HNC en CRL 618 se indican con marcas verticales (violeta). Las líneas de  $[CII]158\ \mu m$  y  $[OIII]88$  y  $52\ \mu m$  no se tratan en los modelos LVG, sólo se muestran ajustes gaussianos a la emisión observada.

## 7.6 CRL 618: UNA PPNe

CRL 618 es un excelente ejemplo de PPNe carbonada en rápida transición hacia la fase de PNe. Se cree que hace unos 200 años cesaron las grandes pérdidas de masa, iniciando así su evolución post-AGB (Bujarrabal *et al.* 1988). En el interior de la CSE existe una región HII compacta creada por un campo de radiación UV ( $G_0 \simeq 10^4$  a  $0.3''$  y  $G_0 \simeq 10^2$  a  $2''$ ) procedente de una estrella central de tipo B0 y temperatura efectiva  $\sim 30000$  K (Justtanont *et al.* 1997). Todo el complejo está rodeado de una densa envoltura de gas y polvo. Las imágenes en el óptico, IR y radio de CRL 618 muestran una morfología bipolar (Carsenty & Solf 1982; Bujarrabal *et al.* 1988; Cernicharo *et al.* 1989; Neri *et al.* 1992 y Hora *et al.* 1996). Las extremas condiciones físicas de la CSE provocadas por el cada vez más intenso campo de radiación UV interior y los choques asociados a la interacción de vientos rápidos de hasta  $200 \text{ km s}^{-1}$  (Cernicharo *et al.* 1989) producen una interesante pero a la vez compleja química circunestelar. Las observaciones en el IR-lejano mostraron, por primera vez en una estrella carbonada, la presencia de especies oxigenadas como  $\text{H}_2\text{O}$  y  $\text{OH}$  (Herpin & Cernicharo 2000). Estas especies no se detectan en el espectro en el IR-lejano de IRC+10216.

Recientemente se ha comenzado un *survey* espectral (SEC. 7.6.3) en el milimétrico y submilimétrico para poder estudiar el contenido molecular de las moléculas polares de la CSE. Este *survey* está compuesto por una gran variedad de líneas moleculares y líneas de recombinación atómicas. La mayoría son líneas rotacionales puras que provienen de los estados vibracionales fundamentales y excitados de  $\text{HC}_3\text{N}$ ,  $\text{HC}_5\text{N}$ ,  $\text{HC}_7\text{N}$  (energías hasta 2000 K) y sus especies isotópicas con  $^{13}\text{C}$ . La gran abundancia de cianopoliinos, cadenas acetiléticas, metano, y la detección del benceno en el IR-medio (Cernicharo *et al.* 2001a y 2001b) indican que durante la transición AGB-PNe, las PPNe ricas en carbono se convierten en las mejores factorías de moléculas orgánicas del espacio. Probablemente en el estado evolutivo de CRL 618, las grandes cantidades de metano y acetileno en fase gaseosa permiten la formación de nuevos hidrocarburos mediante reacciones fotoquímicas. Estas especies podrían ser los pequeños *ladrillos* a partir de los cuales se formarían los agregados moleculares ricos en carbono (véase el CAP. 8 para  $\text{C}_3$  y  $\text{C}_4$ ) responsables de la emisión en las bandas infrarrojas sin identificar (UIBs). Si las especies aromáticas policíclicas (PAHs) son realmente los responsables de las UIBs, esto sugeriría que la formación de los PAHs está relacionada con el procesado que sufren las CSEs ricas en carbono en su evolución post-AGB. Las observaciones de CRL 618 en todos los rangos espectrales están llevando a la conclusión de que el esquema químico circunestelar está dominado por la fotólisis de especies clave como  $\text{CH}_4$  y  $\text{C}_2\text{H}_2$  y por la subsiguiente polimerización en unidades más grandes. En este escenario, la radiación UV procedente de la estrella central domina la química de la envoltura. Sin embargo, otros mecanismos asociados a los choques moleculares y/o a la catálisis en las superficies de los granos de polvo pueden ser también importantes en la fase de PPNe.

### 7.6.1 LÍNEAS DE CO DE BAJA EXCITACIÓN

Los perfiles de CO observados en milimétricas muestran dos componentes asociadas a dos vientos de diferentes velocidades (TABLA 7.3). El viento principal está centrado a una velocidad de  $-22 \text{ km s}^{-1}$ , su velocidad de expansión es aproximadamente  $20 \text{ km s}^{-1}$ . La FIG. 7.1 muestra que la línea ópticamente espesa  $J=1-0$  absorbe la radiación del continuo entre  $-60$  y  $-40 \text{ km s}^{-1}$ . En las siguientes transiciones de CO, esta característica se convierte en una auto-absorción. Este rango de velocidades coincide con la velocidad terminal del viento principal.

El viento de alta velocidad ( $\sim 200 \text{ km s}^{-1}$ ) está asociado con el flujo bipolar observado también en otras transiciones moleculares aunque en un ancho de banda menor (Cernicharo *et al.* 1989). Las alas de los perfiles de CO en milimétricas correspondientes a este viento tienen un forma triangular. Su intensidad respecto a la emisión principal trazada por  $R_I$  aumenta con  $J$ , desde 0.09 ( $J=1-0$ ) hasta más de 2.6 ( $J=7-6$ ). Por lo tanto, la emisión en las líneas de CO de  $J$ -intermedio está dominada por el viento de alta velocidad.

TABLA 7.3: *Parámetros de los diferentes vientos en la CSE de CRL 618.*

Línea de CO ( $J =$ )	$v_{\text{principal}}$ ( $\text{km s}^{-1}$ )	$v_{\text{alas}}$ ( $\text{km s}^{-1}$ )	$R_I$	$\Delta R_I$
1-0 .....	19.7	202.5	0.09	(0.01)
2-1 .....	19.6	204.5	0.22	(0.02)
3-2 .....	18.9	178.5	0.45	(0.03)
6-5 .....	17.1	$>76.0$	$>0.72$	(0.05)
7-6 .....	18.8	$\geq 195.5$	$\geq 2.6$	(0.3)

La incertidumbre en  $v_{\text{principal}}$  y  $v_{\text{alas}}$  es  $0.3 \text{ km s}^{-1}$ .  $R_I$  es el cociente de intensidades integradas entre la emisión principal y la emisión en las alas de cada línea de CO.  $R_I$  y  $v_{\text{alas}}$  en las líneas 7-6 y 6-5 son cotas inferiores debido al insuficiente ancho de banda de las observaciones.

### 7.6.2 EMISIÓN EN EL IR-LEJANO DE CRL 618

En comparación con los dos objetos estudiados anteriormente, la CSE de CRL 618 tiene una cavidad central sin gas molecular rellena por una región HII compacta. Al contrario que en PPnes más evolucionados, la PDR de CRL 618 está todavía muy cerca del objeto central y sus dimensiones angulares son pequeñas. La dilución que esto provoca en el *haz* del LWS hace que el flujo de las especies que proceden de esta región sea muy débil. La FIG. 7.5 muestra la detección de las líneas rotacionales de  $^{12}\text{CO}$  ( $J=14-13$  a  $41-40$ ),  $^{13}\text{CO}$  ( $J=14-13$  a  $19-18$ ), HCN y HNC, y las líneas de estructura fina [CII]158  $\mu\text{m}$  y [OI]63 y 145  $\mu\text{m}$ . Además, el espectro en el IR-lejano muestra por primera vez en una estrella carbonada la presencia de las moléculas oxigenadas  $\text{H}_2\text{O}$  y OH (Herpin & Cernicharo, 2000).

El modelo LVG utilizado en el análisis de la emisión en el IR-lejano es similar al empleado en CRL 2688. Como antes, primero se ajustaron los flujos observados de  $^{12}\text{CO}$  y luego se aplicaron los mismos parámetros al resto de especies consideradas:  $^{13}\text{CO}$ , HCN, HNC,  $\text{H}_2\text{O}$ , OH y [OI] (veanse la TABLAS 7.4 y 7.5) para los parámetros físicos de cada componente y las densidades de columna de cada especie considerada). Las componentes utilizadas en el modelo particular de CRL 618 son (FIG. 7.6):

- (i) Un anillo central que simula la PDR que rodea a la región HII.
- (ii) Los lóbulos que simulan los vientos bipolares moleculares de alta velocidad.
- (iii) La extensa envoltura remanente de la fase AGB.

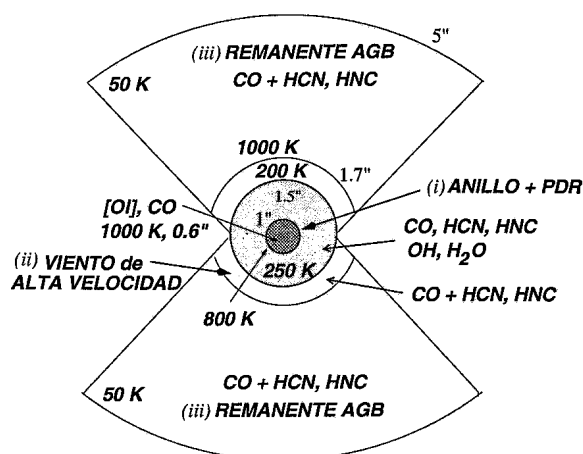


FIGURA 7.6: Esquema y parámetros utilizados en el modelo de CSE para CRL 618.

El anillo (i) interior ( $\theta=1.1''-1.5''$ ) está compuesto por una capa neutra de densidad  $5 \times 10^7 \text{ cm}^{-3}$  y temperaturas 250–800 K que se expande con una velocidad de  $20 \text{ km s}^{-1}$ . La mayoría de la emisión de CO en el IR-lejano proviene de esta región. Justtanont *et al.* (2000) realizaron un modelo para la emisión de CO en el IR-lejano utilizando una componente de densidad  $5 \times 10^7 \text{ cm}^{-3}$  y una temperatura de 700 K. Las temperaturas y densidades del anillo interior en el modelo fueron aquellas que mejor ajustaron los datos. La columna de densidad de  $^{12}\text{CO}$  es  $10^{19} \text{ cm}^{-2}$ , y las columnas de densidad  $^{13}\text{CO}$ , HCN, HNC y OH respecto a la de  $^{12}\text{CO}$  son respectivamente: 1/20, 1/25, 1/1000 y 1/1250. Para reproducir la emisión de  $^{12}\text{CO}$  y  $^{13}\text{CO}$  de en las transiciones rotacionales de  $J$  más alto y la emisión del oxígeno neutro, se tuvo que introducir una capa interior ( $\theta=0.6''$ ) más caliente (1000 K) que simula la frontera interior de la PDR con la región HII ionizada. En esta capa, sólo las especies CO ( $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-2}$ ) y [OI] ( $4.5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-2}$ ) están presentes. La mayoría de la emisión de [CII] proviene de esta región donde sólo el CO resiste parcialmente la fotodisociación molecular. A la resolución espectral del grating puede existir contribución del ISM a la línea [CII] observada. No se trata en los modelos.

Los lóbulos bipolares (ii) representan el viento molecular de alta velocidad descubierto por Cernicharo *et al.* (1989). El estudio de las extensas alas en los perfiles de las líneas mm de CO y de la emisión de  $\text{H}_2$  detectada en el IR-medio (Herpin *et al.* en preparación) sugieren que el gas molecular en esta densa región se calienta fundamentalmente mediante los choques que provocan estos vientos. Esta región caliente es también la responsable de la emisión de CO ( $J$ -alto). Los parámetros físicos elegidos para esta componente fueron escogidos de Cernicharo *et al.* (1989), Neri *et al.* (1992) y Martín-Pintado *et al.* (1995). Los lóbulos bipolares (capas de  $\theta=1.5''$  y  $1.7''$  en el modelo) tienen una densidad de  $10^7 \text{ cm}^{-3}$  y temperaturas que varían entre 1000 K y 200 K (regiones más externas). Podría ser que parte de la emisión de [OI],  $\text{H}_2\text{O}$  y OH surgiera también en estas regiones, donde el gas sometido a choques liberara suficiente oxígeno atómico para recombinarse formando moléculas oxigenadas. Sin embargo, debido a la insuficiente resolución en velocidades de los espectros, no podemos discernir que componente emite más moléculas oxigenadas. Según el análisis de Fong *et al.* (2001), el perfil de la línea [OI]  $63 \mu\text{m}$  observado en el modo Fabry-Perot, además de una componente estrecha ( $\leq 20 \text{ km s}^{-1}$ ) procedente de la PDR, tiene otra componente ancha ( $\sim 66 \text{ km s}^{-1}$ ) que asocian al gas post-choque. Aquí suponemos que las moléculas oxigenadas se forman principalmente por la acción del campo UV (en el interior del anillo) ya que en otras envolturas sometidas también a choques moderados (*p.ej.*, CRL 2688) no se observan OH,  $\text{H}_2\text{O}$  ni [OI] en el IR-lejano.



Por último, la envoltura remanente de la fase AGB (*iii*) es tomada en cuenta por el modelo con una componente ( $\theta=10''$ ) de densidad  $5 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$  y temperatura de 50 K que se expande lentamente con una velocidad de  $20 \text{ km s}^{-1}$ . Estos parámetros para el remanente AGB son consistentes con los estimados por Yamamura *et al.* (1994) y Hajian *et al.* (1996).

Cuando las predicciones de este modelo se comparan con las líneas de CO de baja excitación de  $J=3-2$  a  $7-2$ , los resultados no son muy satisfactorios (véase la TABLA 7.7). Estas discrepancias se deben probablemente a la no esfericidad de la CSE de CRL 618 y al complejo campo de velocidades. Además hay que tener en cuenta que las moléculas de CO están siendo reprocesadas en el interior de la CSE, lo cual hace que el tratamiento detallado de la excitación de la molécula sea complicado. Estos factores no son tenidos en cuenta por el modelo.

TABLA 7.4: *Parámetros de los modelos LVG de CRL 618 y densidades de columna (a).*

REGIÓN	T (K)	$\theta^a$ (arcsec)	$v$ ( $\text{km s}^{-1}$ )	$n(\text{H}_2)$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	$^{12}\text{CO}$ ( $\text{cm}^{-2}$ )	$^{13}\text{CO}$ ( $\text{cm}^{-2}$ )	HCN ( $\text{cm}^{-2}$ )
Anillo+PDR ( <i>i</i> )	1000	0.6	20	$7 \times 10^7$	$1 \times 10^{19}$	$5 \times 10^{17}$	...
	800	1.1	20	$5 \times 10^7$	$6 \times 10^{17}$	$3 \times 10^{16}$	...
	250	1.5	20	$5 \times 10^7$	$1 \times 10^{19}$	$5 \times 10^{17}$	$1 \times 10^{16}$
Viento rápido ( <i>ii</i> )	1000	1.5	200	$1 \times 10^7$	$2 \times 10^{16}$	$1 \times 10^{15}$	$2 \times 10^{15}$
	200	1.7	50	$1 \times 10^7$	$5 \times 10^{18}$	$2.5 \times 10^{17}$	$3 \times 10^{17}$
Remanente AGB ( <i>iii</i> )	50	10	20	$1 \times 10^5$	$7 \times 10^{17}$	$3.5 \times 10^{16}$	$7 \times 10^{16}$

TABLA 7.5: *Parámetros de los modelos LVG de CRL 618 y densidades de columna (b).*

REGIÓN	T (K)	$\theta^a$ (arcsec)	$v$ ( $\text{km s}^{-1}$ )	$n(\text{H}_2)$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	HNC ( $\text{cm}^{-2}$ )	$\text{o-H}_2\text{O}$ ( $\text{cm}^{-2}$ )	OH ( $\text{cm}^{-2}$ )	[OI] ( $\text{cm}^{-2}$ )
Anillo+PDR ( <i>i</i> )	1000	0.6	20	$7 \times 10^7$	...	...	...	$4.5 \times 10^{19}$
	800	1.1	20	$5 \times 10^7$	...	...	...	...
	250	1.5	20	$5 \times 10^7$	$1 \times 10^{16}$	$3 \times 10^{17}$	$8 \times 10^{15}$	...
Viento rápido ( <i>ii</i> )	1000	1.5	200	$1 \times 10^7$	$1 \times 10^{14}$	...	...	...
	200	1.7	50	$1 \times 10^7$	$2 \times 10^{17}$	...	...	...
Remanente AGB ( <i>iii</i> )	50	10	20	$1 \times 10^5$	$7 \times 10^{14}$	...	...	...

<sup>a</sup> ángulo sólido de cada capa considerada

### 7.6.3 EL ESPECTRO DE CRL 618 DESDE 82 A 276 GHz

La caracterización completa del contenido molecular de CRL 618 tiene que realizarse con el complemento de las observaciones en longitudes de onda milimétricas y submilimétricas. En este rango espectral se pueden encontrar las líneas rotacionales de multitud de especies moleculares pesadas y con momento dipolar eléctrico permanente que no producen emisión en el IR-lejano ya que sus niveles energéticos asociados están a miles de grados y no llegan a poblarse suficientemente. Con el objetivo de clarificar la composición química de la CSE de CRL 618 se ha venido realizando un *survey* espectral desde 82 a 276 GHz con el radiotelescopio IRAM-30m (Pico Veleta). Además se ha continuado observando la fuente a mayores frecuencias (280 a 360 GHz) con el radiotelescopio CSO-10.4m (Hawaii). A continuación se presentan los resultados más relevantes para el estudio de la transición AGB-PNe.

## OBSERVACIONES

El radiotelescopio IRAM-30m tiene la mayor apertura efectiva en las ventanas atmosféricas a 3, 2 y 1.3mm. Las observaciones para el *survey* espectral de CRL 618 comenzaron en 1994 y fueron completadas en el invierno 2001-02. Se emplearon un total de 8 receptores acoplados en los siguientes intervalos espectrales: 82-116, 130-184, 201-258 y 240-279 GHz. El enfocado y apuntado durante las observaciones pudo ser comprobado en la misma CRL 618, ya que la fuente emite un continuo de 0.3 K (en  $T_A^*$ ) en todo el rango espectral observado. La precisión del apuntado es de  $\sim 2''$ . Todas las observaciones fueron realizadas en el modo *wobbler-switching*, utilizando desplazamientos angulares de  $\sim 60''$  y frecuencias de  $\sim 1$  Hz. Con este modo y estos parámetros se obtuvieron líneas de base suficientemente planas a pesar de la densidad espectral de líneas moleculares detectada. En los receptores que operan a frecuencias menores que 200 GHz se emplearon bancos filtros que cubren una banda aproximada de 512 MHz y que proporcionan una resolución espectral de 1 MHz. A frecuencias mayores se emplearon autocorreladores cuya resolución espectral es de 1.25 MHz. Las temperaturas de sistema típicas fueron de 100-400 K (a 3 mm), 200-600 K (a 2 mm) y 300-800 K (a 1 mm).

## DETECCIONES

La identificación del elevado número de líneas detectadas se ha realizado mediante un rutina sistemática basada en el catálogo de líneas desarrollado por J. Cernicharo desde 1982 (véase Cernicharo *et al.* 2000b). La mayoría de los picos de emisión no identificados en el catálogo son etiquetados por el procedimiento como línea desconocida (*U*). Sólo algunas líneas particulares fueron identificadas manualmente después del proceso automático.

El *survey* se caracteriza por el elevado número de líneas moleculares y de recombinación detectadas. La mayoría de las líneas identificadas son líneas rotacionales puras en el estado vibracional fundamental y excitados (con energías de hasta 2000 K) de  $\text{HC}_3\text{N}$ ,  $\text{HC}_5\text{N}$ ,  $\text{HC}_7\text{N}$  y sus diversas variantes isotópicas que incluyen la presencia de  $^{13}\text{C}$ . La TABLA 7.6 enumera las moléculas detectadas (preliminar). Muchas de las líneas detectadas muestran perfiles P-Cygni a 2 y 3 mm, mientras que aparecen sólo en emisión a 1 mm y longitudes de onda menores.

La especie más significativa del *survey* es  $\text{HC}_3\text{N}$  (cianoacetileno), que aparece en grupos de líneas separados por  $\sim 9$  GHz. Esta separación corresponde aproximadamente a la distancia en frecuencias de cada transición rotacional dentro de un nivel vibracional (fundamental o excitado). En particular se han detectado 15 estados vibracionales diferentes de  $\text{HC}_3\text{N}$ . Teniendo en cuenta las variantes isotópicas, isoméricas y los niveles vibracionales, se han encontrado  $\sim 30$  formas diferentes de líneas rotacionales de  $\text{HC}_3\text{N}$ . La propiedad fundamental que hace posible la observación de  $\text{HC}_3\text{N}$  en varios niveles vibracionales es la relativa baja energía de sus amplios movimientos en sus modos de *flexión*.

## $\text{HC}_3\text{N}$ EN EL ESTADO FUNDAMENTAL

Las líneas rotacionales de  $\text{HC}_3\text{N}$  en el estado fundamental muestran emisión en las alas de los perfiles procedente del viento rápido detectado en CO por Cernicharo *et al.* 1989 (véase también la SEC. 7.6.1). La anchura de los perfiles en algunas líneas es de  $\sim 200 \text{ km s}^{-1}$ . Además, existe otra componente asociada a una envoltura molecular que se expande lentamente alrededor de la región ionizada del interior de la CSE. La anchura a media potencia de esta componente es de  $20 \text{ km s}^{-1}$  y aparece centrada a la velocidad LSR de CRL 618 ( $-21.3 \text{ km s}^{-1}$ ).

Además, se observan dos absorciones en la emisión desplazada hacia el azul. La primera aparece a  $-37 \text{ km s}^{-1}$ . Esta es la velocidad más negativa a la que se observa la absorción en las líneas de  $\text{HC}_3\text{N}$  procedentes de niveles vibracionales excitados. En las líneas de  $\text{HC}_3\text{N}$  con  $\nu=0$  la absorción aparece hasta  $J_{up}=37$  mientras que en las líneas de estados vibracionales excitados desaparece para  $J_{up}>20$ . Esta absorción está relacionada con el gas alrededor de la región HII que se expande a  $\sim 9 \text{ km s}^{-1}$ . La presencia de gas en frente de la fuente de continuo permite la formación de esta componente en absorción. La segunda componente en absorción aparece a  $-55 \text{ km s}^{-1}$ . En un principio se podría pensar que corresponde a la velocidad terminal del viento principal remanente de la envoltura AGB. En las líneas de  $J$ -bajo de  $\text{HCN}$  (Neri *et al.* 1992) y  $\text{CO}$  (Cernicharo *et al.* 1989, SEC. 7.6.1) esta es la explicación a la absorción observada entre  $-60$  y  $-40 \text{ km s}^{-1}$ . Sin embargo, se ha comprobado que la absorción observada en las líneas de  $\text{HC}_3\text{N}$  del nivel vibracional fundamental con  $J$ -intermedio está producida por líneas del nivel  $\nu_5 1e$  de  $\text{HC}_3\text{N}$ , que a esas frecuencias está muy próximo a las de  $\text{HC}_3\text{N}$  en el estado fundamental. Además, el hecho de que en las líneas de  $\text{HC}_3\text{N}$  tampoco se observe absorción a las frecuencias de la velocidad terminal del viento rápido indica que este flujo de alta velocidad está colimado (Neri *et al.* 1992), pero no en la línea de mirada hacia la fuente de continuo.

### $\text{HC}_3\text{N}$ EN ESTADOS VIBRACIONALES EXCITADOS

Los perfiles en las líneas de  $\text{HC}_3\text{N}$  en niveles vibracionales<sup>1</sup> excitados son más sencillos que en el nivel fundamental ya que no se ha observado evidencia de alas procedentes del viento rápido (véase la FIG. 7.7). En la región de 1 mm estas líneas aparecen en emisión con un anchura a media potencia típica de  $20 \text{ km s}^{-1}$ . Sin embargo, en la región espectral del *survey* entre 2 y 3 mm las líneas muestran perfiles P-Cygni. La componente en absorción de estos perfiles aparece sistemáticamente más intensa a bajas frecuencias. Cuando la absorción es más intensa, esta aparece a velocidades LSR de  $-31 \text{ km s}^{-1}$ , lo que es compatible con una envoltura de gas que se expande alrededor de la fuente de continuo a  $9\text{--}10 \text{ km s}^{-1}$ . La absorción se desplaza hacia el azul cuando esta es menos intensa ( $J_{up}$  aumenta) debido a un efecto de opacidad. No se han encontrado absorciones situadas a velocidades más negativas que  $-40 \text{ km s}^{-1}$  (FIG. 7.8).

A frecuencias menores que 80 GHz, casi todas las líneas de las especies moleculares encontradas en CRL 618 aparecen únicamente en absorción, lo cual sugiere que la temperatura del continuo es demasiado alta para permitir la emisión del gas frío que trazan esas líneas. La velocidad a la que aparecen las líneas rotacionales de niveles vibracionales excitados con  $J_{up}<7$  en absorción (observadas con el telescopio Effelsberg-100m) es de  $-28 \text{ km s}^{-1}$  (Wyrowski *et al.* 2003). También se ha observado absorción a esta velocidad en las líneas de  $\text{HCN}$  de tipo- $l$  (Thorwirth *et al.* 2003) y en la línea (3,3) de  $\text{NH}_3$  (Martín-Pintado *et al.* 1995b).

Toda esta información sugiere que la emisión de  $\text{HC}_3\text{N}$  en estados vibracionales excitados surge de una región compacta alrededor de la región HII, que se expande a una velocidad aproximada de  $10 \text{ km s}^{-1}$ . Las observaciones interferométricas muestran que esta región tiene unas dimensiones angulares de  $3''$  (Neri *et al.* 1992).

<sup>1</sup>La notación empleada para los estados vibracionales de  $\text{HC}_3\text{N}$  es  $(\nu_4, \nu_5, \nu_6, \nu_7)$ , donde  $\nu_n$  representa el número cuántico de los modos vibracionales en orden decreciente de energía. Los modos de *flexión*  $\nu_5, \nu_6, \nu_7$  están doblemente degenerados pero el desdoblamiento- $l$  rompe la degeneración. El estado vibracional  $\nu_4$  es el modo de *tensión* de más baja energía ( $\sim 1200 \text{ K}$ ). El resto de modos de *tensión* no se detectan en CRL 618.

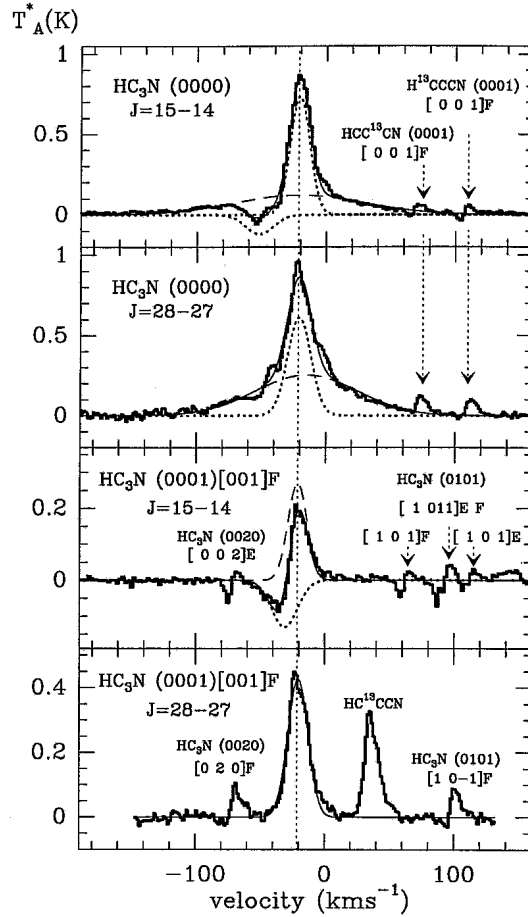


FIGURA 7.7: Componentes de la emisión de  $\text{HC}_3\text{N}$  en CRL 618. En el estado vibracional fundamental (2 paneles superiores) están presentes la componente ancha asociada al viento rápido ( $\sim 200 \text{ km s}^{-1}$ ) y la componente estrecha asociada con la envoltura molecular que rodea a la región HII. La absorción a  $-55 \text{ km s}^{-1}$  en la línea  $J=15-14$  está causada por el solapamiento de las líneas de  $\text{HC}_3\text{N}$  en el nivel vibracional fundamental (00000) con las del nivel excitado (01000). Los estados vibracionales excitados (2 paneles inferiores) no muestran ninguna componente ancha asociada al viento rápido. La absorción producida por la componente de gas alrededor de la fuente de continuo está centrada a unos  $-27 \text{ km s}^{-1}$ , desapareciendo en las líneas con  $J_{\text{up}} > 20$ .

TABLA 7.6: Lista preliminar de moléculas detectadas en el survey de CRL 618

n°. átomos	ESPECIE						
2	CO	CN	CS	SiO	$^{13}\text{CO}$	$^{18}\text{CO}$	$^{13}\text{CN}$
3	HCN	$\text{HCO}^+$	HNC	$\text{H}^{13}\text{CN}$	$\text{H}^{13}\text{CO}^+$	$\text{HNC}^{13}$	
	$\text{NNH}^+$	CCH	$\text{MgNC}$				
4	$\text{H}_2\text{CO}$	$\text{C}_3\text{N}$	$\text{C}_3\text{H}$				
5	$\text{HC}_3\text{N}$	$\text{C}_3\text{H}_2$	$\text{C}_4\text{H}$	HCCNC	$\text{H}^{13}\text{CCCN}$	$\text{HC}^{13}\text{CCN}$	$\text{HCC}^{13}\text{CN}$
6	$\text{C}_5\text{H}$	$\text{H}_2\text{C}_4$	$\text{CH}_3\text{CN}$				
7	$\text{HC}_5\text{N}$	$\text{C}_6\text{H}$	$\text{CH}_3\text{CCH}$	$\text{CH}_2\text{CHCN}$			
$\geq 8$	$\text{HC}_7\text{N}$						

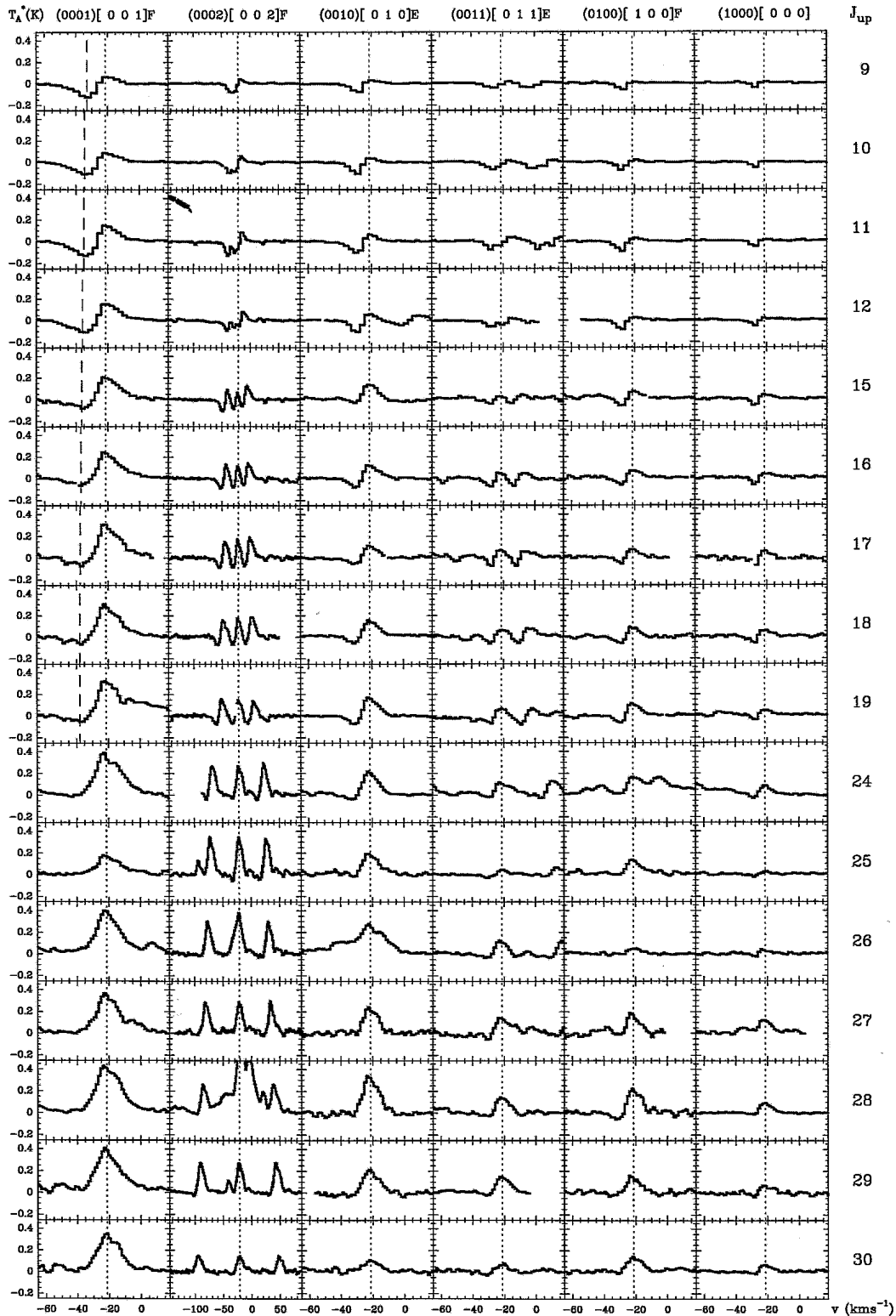


FIGURA 7.8: Líneas rotacionales puras de  $\text{HC}_3\text{N}$  en diferentes estados vibracionales. La línea discontinua a puntos muestra la velocidad LSR de CRL 618 ( $-21.3 \text{ km s}^{-1}$ ). La línea discontinua a trazos en las 9 primeras líneas rotacionales del nivel  $(0001)[0 0 1]F$  muestra la velocidad de la máxima absorción. Esta se desplaza hacia la izquierda cuando la absorción es menos intensa (cuando aumenta  $J_{\text{up}}$ ). Esto sugiere que el origen de la absorción es la misma envoltura en expansión que produce la emisión y el desplazamiento se trata de un efecto de opacidad.

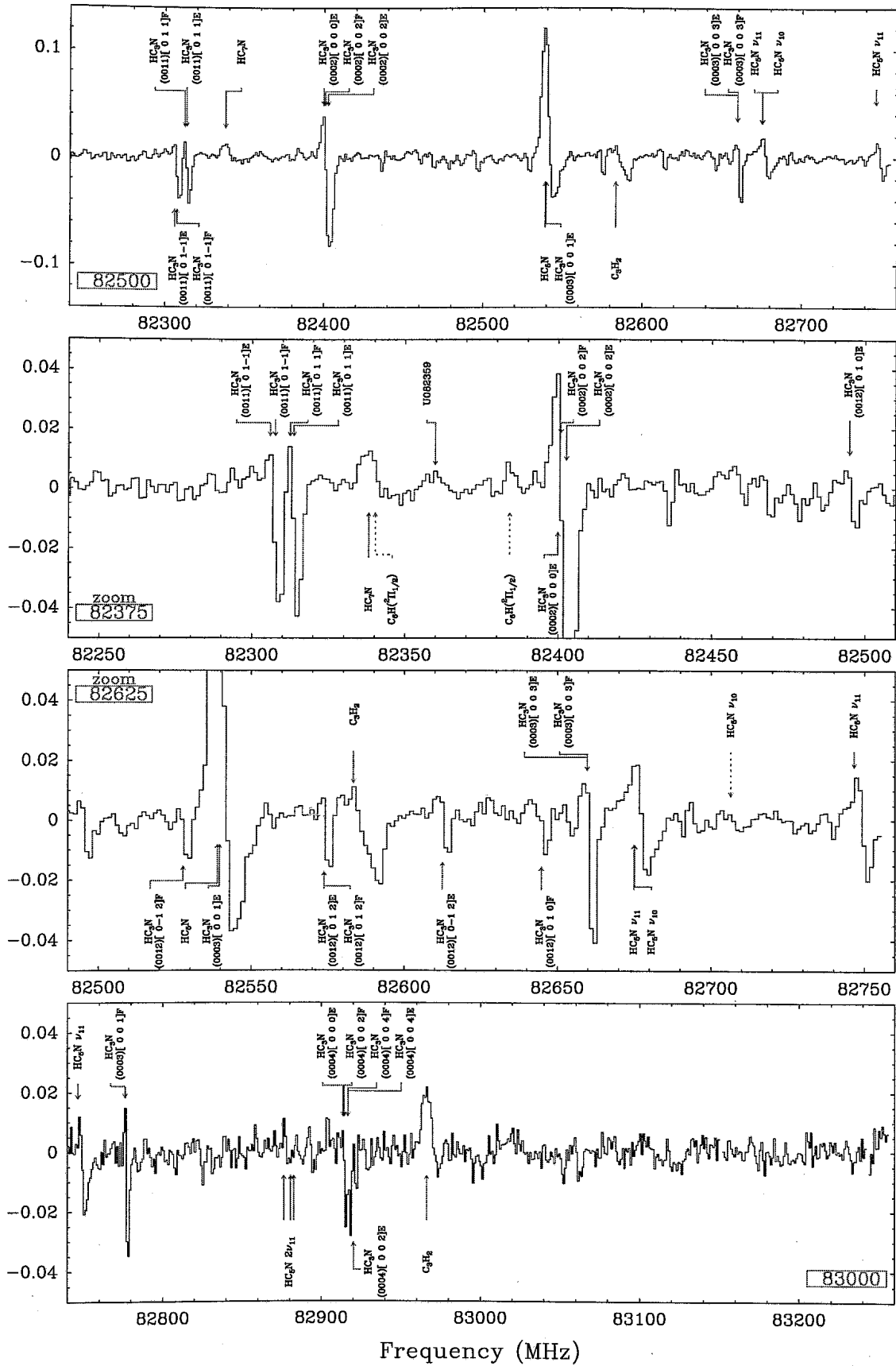


FIGURA 7.9: Parte del survey espectral de CRL 618 a  $\lambda=3$  mm. La ordenada corresponde a la temperatura de antena  $T_A^*$  (K) y la abcisa corresponde a la frecuencia de la observación (MHz).

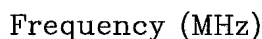


FIGURA 7.10: Parte del survey espectral de CRL 618 a  $\lambda=2$  mm. La ordenada corresponde a la temperatura de antena  $T_A^*$  (K) y la abscisa corresponde a la frecuencia de la observación (MHz).

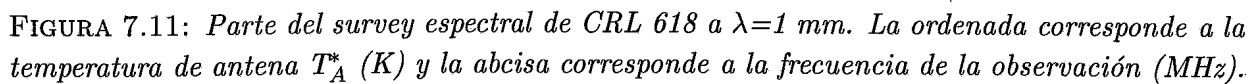




TABLA 7.7: *Flujos observados en CRL 2688, CRL 618 y NGC 7027 y estimaciones de los modelos LVG para las líneas de CO en milimétricas y submilimétricas para cada fuente.*

Línea de CO ( $J =$ )	CRL 2688		CRL 618		NGC 7027	
	$F_{obs}$ (Jy)	$F_{mod}$ (Jy)	$F_{obs}$ (Jy)	$F_{mod}$ (Jy)	$F_{obs}$ (Jy)	$F_{mod}$ (Jy)
1-0 .....	30	10	23	21	36	24
2-1 .....	70	30	47	66	70	83
3-2 .....	271	296	79	197	364	475
4-3 .....	373	429	...	400	516	498
6-5 .....	640	650	320	742	520	893
7-6 .....	760	790	232	994	840	1061

#### 7.6.4 CAMBIOS DESDE LA ETAPA EVOLUTIVA ANTERIOR

Como en la etapa anterior de PPNe joven representada por CRL 2688, los choques provocados por la interacción de los nuevos vientos con el remanente AGB siguen teniendo un importante papel para la química de CSE. Hay que tener en cuenta que la velocidad de los vientos rápidos es mayor en CRL 618. Sin embargo, el aumento de la temperatura efectiva del objeto central (un orden de magnitud respecto a la fase AGB) produce un intenso campo de radiación UV que comienza a reprocesar el contenido molecular del interior de la CSE. Esto se demuestra por los cambios en las abundancias de especies moleculares como HCN y HNC respecto a la fase AGB, la elevada abundancia de cianopoliinos, la presencia de poliinos, benceno (Cernicharo *et al.* 2001a; 2001b) y la presencia de moléculas oxigenadas en el IR-lejano. La química está ahora dominada por la fotólisis de algunas especies moleculares clave para el esquema químico de la CSE. La detección de líneas de estructura fina de [OI] y [CII] es consecuencia de la fotodisociación de CO. El gas de la envoltura es ahora enfriado fundamentalmente por las líneas de CO ( $J$ -alto) y por las líneas de [OI] y [CII].

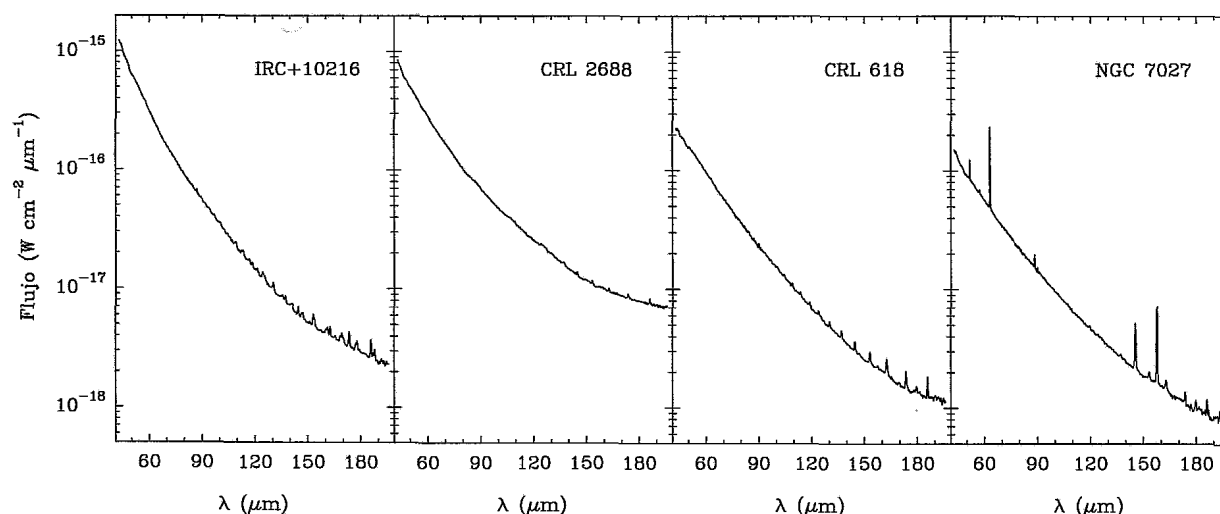


FIGURA 7.12: *Espectro ISO/LWS de IRC+10216, CRL 2688, CRL 618 y NGC 7027.*

## 7.7 NGC 7027: UNA PNe JOVEN

NGC 7027 es una de las PNe mejor estudiadas de la galaxia. Se trata del objeto más evolucionado de la muestra y cierra el estudio sobre la transición AGB-PNe. La temperatura efectiva de su objeto central es aproximadamente 200000 K (Latter *et al.* 2000) y se piensa que abandonó la fase AGB hace unos 1000 años (Volk & Kwok 1997). El gas en las regiones más internas de la CSE está completamente ionizado y la emisión está dominada por el intenso radio continuo. En el IR-lejano esta región es emisora de líneas atómicas e iónicas de estructura fina (Liu *et al.* 1996). El campo de radiación UV procedente del objeto central ha creado una PDR entre la CSE ionizada y la CSE externa (molecular) de dimensiones mucho mayores que la asociada a CRL 618. Las condiciones físicas en la PDR de NGC 7027 hicieron posible la primera detección de líneas rotacionales de  $\text{CH}^+$  en el espacio (Cernicharo *et al.* 1997b). La emisión del hidrógeno molecular en la región es consistente con la excitación radiativa producida por fotones UV (Cox *et al.* 1997). A pesar del avanzado estado evolutivo de NGC 7027, las regiones internas de la CSE todavía están rodeadas por una extensa envoltura molecular, remanente de la CSE de la fase AGB, con unas dimensiones angulares aproximadas de  $15''$  trazada por las líneas rotacionales de CO  $J$ -bajo (Jaminet *et al.* 1991). También es una fuente con intensas bandas en el IR-cercano y -medio asociadas a la emisión de PAHs (Beintema *et al.* 1996).

### 7.7.1 LÍNEAS DE CO DE BAJA EXCITACIÓN

Los perfiles de las líneas de CO (véase la FIG. 7.1) son notablemente asimétricos, lo cual refleja la compleja estructura cinemática de la PNe. La emisión principal está centrada a  $v_{LSR} = +27-30 \text{ km s}^{-1}$ . La velocidad de expansión de esta componente es de  $15 \text{ km s}^{-1}$  para las líneas  $J=1-0$ ,  $2-1$ ,  $3-2$  y  $4-3$ , y de  $20 \text{ km s}^{-1}$  para las líneas  $J=6-5$  y  $7-6$  (TABLA 7.8). La mayor velocidad encontrada en las transiciones de  $J$ -intermedio probablemente indique la presencia de un viento de moderada velocidad en el interior de la CSE ( $6''-10''$ ). Este viento podría estar dominado por la presión de radiación de la región ionizada sobre las primeras capas neutras de la CSE, donde probablemente se exciten las líneas de CO  $J=7-6$  y  $6-5$  (véase  $v_{principal}$  para estas líneas en la TABLA 7.8). Jaminet *et al.* (1991) encontró una velocidad de expansión de  $15 \text{ km s}^{-1}$  y una extensión de  $5''-15''$  para la componente principal trazada por las líneas de CO  $J=2-1$  y  $3-2$ , en buen acuerdo con nuestras nuevas observaciones. En ese trabajo también se encontraron cotas para la dispersión en velocidades en la CSE; menor que  $3 \text{ km s}^{-1}$  en la envoltura interior ( $<10''$ ) y mayor que  $1 \text{ km s}^{-1}$  en la envoltura exterior ( $>10''$ ). Al igual que en los espectros de CRL 2688 y CRL 618, los perfiles de CO  $J$ -bajo de NGC 7027 también muestran una auto-absorción a  $\sim 10 \text{ km s}^{-1}$  (FIG. 7.1).

Aunque la línea de CO  $J=1-0$  está ligeramente contaminada por la emisión de la línea de recombinación del hidrógeno  $38\alpha$  (desplazada sólo  $-8.3 \text{ km s}^{-1}$  respecto al centro de la línea), los perfiles de CO muestran emisión a altas velocidades (principalmente en la emisión desplazada hacia el rojo). Esta puede ser la huella de un viento rápido que avanza con una velocidad de expansión próxima a  $45 \text{ km s}^{-1}$  y que no fue citado en Jaminet *et al.* (1991). Este viento podría ser la reliquia del viento rápido característico de la fase de PPNe que se observa en CRL 2688 y CRL 618. Sin embargo, la importancia de estos vientos en NGC 7027 es menor que en las fuentes anteriores ya que el cociente  $R_I$  en todas las líneas rotacionales de CO observadas es siempre menor que 0.1.

TABLA 7.8: *Parámetros de los diferentes vientos en la CSE de NGC 7027.*

Línea de CO ( $J =$ )	$v_{\text{principal}}$ ( $\text{km s}^{-1}$ )	$v_{\text{alas}}$ ( $\text{km s}^{-1}$ )	$R_I$	$\Delta R_I$
1-0 .....	14.6	47.2	0.04	(0.01)
2-1 .....	14.3	43.2	0.09	(0.01)
3-2 .....	16.0	30.0	0.07	(0.02)
4-3 .....	18.3	25.1	0.07	(0.02)
6-5 .....	20.0	24.7	0.06	(0.02)
7-6 .....	20.0	23.8	0.09	(0.02)

La incertidumbre en  $v_{\text{principal}}$  y  $v_{\text{alas}}$  es  $0.3 \text{ km s}^{-1}$ .  $R_I$  es el cociente de intensidades integradas entre la emisión principal y la emisión en las alas de cada línea de CO.

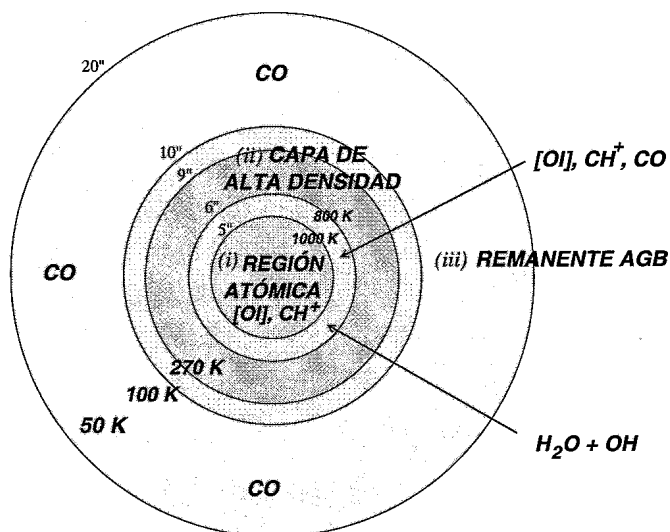
### 7.7.2 EMISIÓN EN EL IR-LEJANO DE NGC 7027

El espectro de NGC 7027 en el IR-lejano (FIG. 7.5) está dominado por la emisión de líneas de estructura fina característica de una PNe: [OI], [CII], [NII], [NIII] y [OIII]. Además, la emisión molecular sigue siendo importante. En particular se detectan las líneas rotacionales de  $^{12}\text{CO}$  ( $J=14-13$  a  $25-24$ ) y algunas de  $^{13}\text{CO}$ . A pesar de la química rica en carbono de la CSE, se han identificado varias líneas de OH. Sin embargo no se detecta emisión de vapor de agua.

Cernicharo *et al.* (1997b) descubrieron en este objeto las primeras líneas rotacionales de  $\text{CH}^+$  ( $J=2-1$  a  $7-6$ ) en el espacio. La FIG. 7.5 muestra que estas líneas son especialmente intensas. También se detectan varias líneas de CH (a  $\sim 149$ ,  $\sim 180$  y  $\sim 115 \mu\text{m}$ ). Finalmente no se ha identificado ninguna línea de HCN o HNC, compatible con la baja abundancia ( $9 \times 10^{-9}$ ) derivada por Deguchi *et al.* (1990) para esta PNe.

Para ajustar la emisión molecular en el IR-lejano se han utilizado tres componentes diferenciadas en el modelo LVG (TABLAS 7.9 y 7.10):

- (i) Una región atómica de alta densidad (región más externa de la PDR).
- (ii) Una capa molecular de alta densidad que hace de transición a la CSE externa.
- (iii) El remanente de envoltura AGB donde se observa el viento principal.

FIGURA 7.13: *Esquema y parámetros utilizados en el modelo de CSE para NGC 7027.*

Los tamaños de las diferentes componentes han sido escogidas de Yan *et al.* (1999) y Jaminet *et al.* (1991). La región atómica (i) se ha subdividido en dos capas de 1000 K ( $\theta=5''$ ) y 800 K ( $\theta=6''$ ) (Cernicharo *et al.* 1997b; Liu *et al.* 1996; Hasegawa *et al.* 2000). La densidad en esta componente es  $5 \times 10^7 \text{ cm}^{-3}$  y la velocidad de expansión es  $15 \text{ km s}^{-1}$ . En la capa más caliente e interna (frontera de la región HII con la PDR), sólo [OI] y  $\text{CH}^+$  están presentes (la emisión iónica no es tenida en cuenta por el modelo). En la capa externa se introduce  $^{12}\text{CO}$ ,  $^{13}\text{CO}$ , y OH. La considerable abundancia de OH sugiere que  $\text{H}_2\text{O}$  probablemente estuvo presente en alguna etapa evolutiva anterior (véase el caso de CRL 618). Quizás con mayor sensibilidad y resolución espectral pueda incluso detectarse alguna línea de agua en NGC 7027. Para considerar este caso, se introdujo el vapor de agua en esta región donde podría coexistir con OH. La cota máxima estimada para la abundancia de  $\text{H}_2\text{O}$  es  $1.5 \times 10^{-7}$ , un  $\sim 50\%$  más bajo que el valor obtenido por Volk & Kwok (1997). Los mejores ajustes se obtienen para unas abundancias (respecto a  $^{12}\text{CO}$ ) de  $^{13}\text{CO}$ , OH,  $\text{CH}^+$  y [OI] respectivamente de:  $<1/40$ ,  $1/20$ ,  $1/80$ , y  $875$ .

Comparando con los modelos realizados por otros autores, los presentes ajustes necesitan necesidades más altas que las utilizadas por Liu *et al.* (1996), que emplearon densidades entre  $10^5$  y  $10^6 \text{ cm}^{-3}$  para ajustar la emisión de CO ( $J$ -alto) en la región caliente (1000–700 K). Respecto a la velocidad de expansión de la región ionizada, Jaminet *et al.* (1991) derivaron un valor de  $17.6 \text{ km s}^{-1}$ , similar al utilizado en la región atómica del modelo LVG.

En la capa intermedia de alta densidad (ii) con  $\theta=9''$  se ha considerado una temperatura de 270 K, una velocidad de expansión de  $10 \text{ km s}^{-1}$  y una densidad de  $1 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$  (Volk & Kwok 1997; Yan *et al.* 1999; Jusstanont *et al.* 2000). Para estos valores se obtiene una elevada densidad de columna de  $^{12}\text{CO}$ , aproximadamente  $2.1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ .

El remanente AGB (iii) tiene una extensión angular comprendida entre  $\theta=10''$  y  $20''$ , donde se ha supuesto que la temperatura desciende de 100 a 50 K, y la densidad de  $3 \times 10^5$  a  $1 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$  (Hasegawa *et al.* 2000). Como indica la TABLA 7.8, la velocidad de expansión es  $15 \text{ km s}^{-1}$ . La capa externa a 50 K sólo es relevante para ajustar la emisión de CO de baja excitación. La densidad de columna de  $^{12}\text{CO}$  es  $(1.5\text{--}1.7) \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ , y el cociente  $^{12}\text{CO}/^{13}\text{CO}$  es siempre menor que 30. Que la emisión de CO se ha observado sobre una región que se extiende angularmente hasta  $\sim 40''$  (Masson *et al.* 1985). Las predicciones del modelo son satisfactorias para las líneas de CO  $J=1\text{--}0$  a  $4\text{--}3$ , pero los flujos son demasiado altos cuando se comparan con las líneas  $J=6\text{--}5$  y  $7\text{--}6$  (TABLA 7.7). Esto pone de manifiesto la complejidad cinemática de la CSE en las regiones de excitación intermedia.

TABLA 7.9: Parámetros de los modelos LVG de NGC 7027 y densidades de columna (a).

REGIÓN	T (K)	$\theta^a$ (arcsec)	$v$ ( $\text{km s}^{-1}$ )	$n(\text{H}_2)$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	$^{12}\text{CO}$ ( $\text{cm}^{-2}$ )	$^{13}\text{CO}$ ( $\text{cm}^{-2}$ )	o- $\text{H}_2\text{O}$ ( $\text{cm}^{-2}$ )
Región Atómica (i)	1000	5	15	$5 \times 10^7$	...	...	...
	800	6	15	$5 \times 10^7$	$8 \times 10^{15}$	$2.7 \times 10^{14}$	$<2.6 \times 10^{13}$
Capa alta densidad (ii)	270	9	10	$1 \times 10^6$	$2.1 \times 10^{17}$	$7 \times 10^{15}$	...
Remanente AGB (iii)	100	10	15	$3 \times 10^5$	$1.5 \times 10^{17}$	$5 \times 10^{15}$	...
	50	20	15	$1 \times 10^4$	$1.7 \times 10^{17}$	$5.7 \times 10^{15}$	...

<sup>a</sup> ángulo sólido de cada capa considerada

TABLA 7.10: *Parámetros de los modelos LVG de NGC 7027 y densidades de columna (b).*

REGIÓN	T (K)	$\theta^a$ (arcsec)	$v$ (km s <sup>-1</sup> )	$n(\text{H}_2)$ (cm <sup>-3</sup> )	OH (cm <sup>-2</sup> )	[OI] (cm <sup>-2</sup> )	CH <sup>+</sup> (cm <sup>-2</sup> )
Región Atómica (i)	1000	5	15	$5 \times 10^7$	...	$2 \times 10^{19}$	$9 \times 10^{13}$
	800	6	15	$5 \times 10^7$	$4 \times 10^{14}$	$7 \times 10^{18}$	$1 \times 10^{14}$
Capa alta densidad (ii)	270	9	10	$1 \times 10^6$	...	...	...
Remanente AGB (iii)	100	10	15	$3 \times 10^5$	...	...	...
	50	20	15	$1 \times 10^4$	...	...	...

<sup>a</sup> ángulo sólido de cada capa considerada

### 7.7.3 CAMBIOS DESDE LA ETAPA EVOLUTIVA ANTERIOR

La característica principal de esta joven PNe en comparación con los objetos post-AGB anteriores es la significativa deceleración de los vientos moleculares rápidos en la CSE. La temperatura efectiva del objeto central es tan elevada que el campo de radiación UV que produce ( $10^4 \leq G_0 \leq 10^5$ ; Burton *et al.* 1990), domina todos los mecanismos químicos en la CSE. Como consecuencia, las abundancias moleculares se han modificado notablemente desde la fase de PPNe. El vapor de agua y HCN han desaparecido casi por completo, mientras que otras nuevas especies como CH<sup>+</sup> se forman eficientemente. La envoltura molecular está muy alejada de las regiones fotosféricas. El espectro de NGC 7027 en el IR-lejano está ahora dominado por la emisión de la región HII y de la PDR en el interior de la CSE. El efecto refrigerador de las líneas rotacionales de CO es mucho menos importante y está ahora dominado por la emisión de líneas atómicas e iónicas de estructura fina.

## 7.8 DISCUSIÓN GLOBAL

El primer objeto de la muestra, CRL 2688, acaba de abandonar la fase de AGB. La temperatura efectiva de la estrella central no es lo suficientemente elevada como para producir una fotodisociación considerable del interior de la CSE. El espectro en el IR-lejano está dominado por la emisión molecular (CO y HCN). Los modelos LVG realizados de esta fuente, reproducen satisfactoriamente los flujos observados. Sin embargo, la detección de los polinos C<sub>4</sub>H<sub>2</sub> y C<sub>6</sub>H<sub>2</sub> indica que algunos cambios químicos en el reprocesado de la CSE ya han comenzado, puesto que este tipo de especies moleculares no se observan en IRC+10216.

Además del remanente de CSE AGB que se expande lentamente, CRL 2688 muestra vientos moleculares más rápidos que surgen del interior de la CSE y que horadan la envoltura AGB. Esta es una de las características principales del comienzo de la fase PPNe. En este punto de la evolución, la emisión molecular es el mecanismo refrigerador del gas más importante.

A la sensibilidad de los detectores del LWS no se ha detectado emisión de <sup>13</sup>CO, lo cual es compatible con un cociente <sup>12</sup>CO/<sup>13</sup>CO > 25. En IRC+10216 se ha determinado un cociente <sup>12</sup>CO/<sup>13</sup>CO ≈ 45 (Cernicharo *et al.* 1996b), indicando que ya en el comienzo de la evolución post-AGB el gas comienza a ser reprocesado. Jaminet *et al.* 1992 han argumentado que los procesos nucleares CNO en la estrella central de CRL 2688 inyectan material enriquecido en la CSE que pasa a formar parte de los vientos rápidos que surgen del interior de la envoltura. Para el remanente AGB en expansión lenta, estos autores encuentran <sup>12</sup>CO/<sup>13</sup>CO = 20, mientras que en el viento rápido encuentran un valor de ~5.

El cociente HCN/CO en IRC+10216 es  $\sim 1/10$ , mucho más elevado que en los vientos rápidos de los objetos post-AGB estudiados. HNC no ha sido detectado en el espectro en el IR-lejano de CRL 2688. Esta molécula se produce fundamentalmente a partir de reacciones químicas *ion-neutro*. Las condiciones físicas necesarias para su producción eficiente aún no se dan en la CSE de CRL 2688 (pero sí en CRL 618).

En CRL 618 se han detectado especies oxigenadas como OH y H<sub>2</sub>O que no se esperaban *a priori* para esta PPNe carbonada. Además se han descubierto cadenas poliacetilénicas, poliinos y benceno (Cernicharo *et al.* 2001a; 2001b). El campo de radiación UV procedente del objeto central está fotodisociando la mayoría de especies moleculares formadas durante la fase AGB, lo cual ya permite un esquema fotoquímico dominado por reacciones *ion-neutro*. Esta evolución en la química de la CSE conduce a la formación de especies ricas en oxígeno y la variación en la abundancia de moléculas carbonadas como HCN y HNC. Durante la fase AGB la abundancia de HCN es significativamente superior a la de HNC, mientras que en la etapa de PPNe, se ha comprobado que sus abundancias son similares. Debido a las altas temperaturas en la PDR de CRL 618, el radical OH puede formarse mediante reacciones endotérmicas entre H<sub>2</sub> y el oxígeno atómico. El aumento de la densidad de columna en la CSE permite la subsecuente formación de H<sub>2</sub>O a través de nuevas reacciones con H<sub>2</sub>.

En NGC 7027 la temperatura del objeto central es tan elevada que el campo de radiación UV estelar ha ionizado y fotodisociado una parte substancial de la CSE. Entre la región ionizada interior y la región externa y neutra de la CSE existe una PDR donde el número total de moléculas de CO es sólo el 2% de los iones C<sup>+</sup> (Liu *et al.* 1996). En otras palabras, la mayoría del CO ha sido fotodisociado. La región HII no ha sido tenida en cuenta en los modelos aquí presentados, aunque la densidad electrónica en la región ionizada puede tener su influencia en la excitación de algunas especies moleculares. En particular los impactos con electrones pueden ser importantes en la excitación de CH<sup>+</sup>. En la capa más interna (1000 K) considerada en nuestros modelos, la formación de esta especie se puede alcanzar vía  $C^+ + H_2 \rightarrow CH^+ + H$  (energía de activación  $\sim 4000$  K). Las tasas de formación de este mecanismo (Sternberg & Dalgarno 1995) pueden ser lo suficiente altas como para producir las densidades de columna derivadas. La alta temperatura, densidad e intensidad del campo de radiación UV en la PDR permite también la formación de CH<sub>2</sub><sup>+</sup> y CH<sub>3</sub><sup>+</sup> a partir de CH<sup>+</sup>. La recombinación disociativa de estas dos especies puede formar cantidades significativas de CH a  $\sim 800$  K (Sternberg & Dalgarno 1995). Liu *et al.* 1997 derivaron un cociente de abundancias CH<sup>+</sup>/CH  $\simeq 5$ . La detección de dos líneas de CH con un cociente de intensidades CH 180.7/149.2  $\mu\text{m} \simeq 0.8$  (primer excitado / nivel fundamental) confirma la presencia de mecanismos en las regiones moleculares más internas y calientes. El problema de la excitación de CH es complicado porque la excitación de la molécula en estas regiones está dominada por las colisiones con hidrógeno molecular y atómico.

La presencia de [OI] de CH<sup>+</sup> en la capa a 1000 K de la región atómica y la baja densidad de columna de CO en la capa a 800 K confirma que en el interior de la CSE las moléculas de CO han sido mayoritariamente reprocesadas. En los modelos de Hasegawa *et al.* (2000) se argumenta que gran parte de la emisión de CO observada en este tipo de objetos procede de moléculas recién formadas. Sin embargo, el remanente de envoltura AGB no ha sido completamente reprocesado al comienzo de la fase de PNe. En el caso particular de NGC 7027, la región HII y la PDR todavía constituyen una fracción relativamente total de la masa circunestelar.

El estudio de CRL 618 ha mostrado que especies oxigenadas como OH y H<sub>2</sub>O pueden ser producidas en su CSE. Sin embargo, estas moléculas son rápidamente reprocesadas. La evidencia observacional es la ausencia de emisión de H<sub>2</sub>O en NGC 7027.

Algunos modelos de equilibrio químico predicen la ausencia casi completa de H<sub>2</sub>O en NGC 7027 (*p.ej.*, McCabe *et al.* 1979). Sólo en condiciones alejadas del equilibrio, una pequeña fracción del oxígeno estaría en forma de vapor de agua (Volk & Kwok 1997). La detección de OH en NGC 7027 y la ausencia de agua indican que si en un estado evolutivo anterior hubo una cantidad significativa de H<sub>2</sub>O, esta ha sido prácticamente reprocesada al pasar a la fase de PNe. Bajo las condiciones físicas de NGC 7027, la explicación más simple para la ausencia de H<sub>2</sub>O es la fotodisociación de H<sub>2</sub>O en OH + H, lo cual concuerda con el aumento de la abundancia de OH (respecto a CO) en un factor 60 en comparación con la fase anterior de PPNe.

En cuanto a HCN, la mayoría de las moléculas presentes en la fase de AGB y PPNe han debido ser fotodisociadas en H y CN. La abundancia de CN en NGC 7027 es considerable (CN/HCN=9; Bachiller *et al.* 1997). La elevada abundancia de C<sup>+</sup> proviene de la fotoionización del carbono neutro liberado en la destrucción de moléculas carbonadas, en especial CO y HCN.

Las abundancias (respecto a <sup>12</sup>CO) de todas las especies tratadas en los modelos de CRL 2688, CRL 618 y NGC 7027 se presentan resumidas en la TABLA 7.11.

TABLA 7.11: Abundancias (respecto a <sup>12</sup>CO) de las especies consideradas en los modelos LVG para los objetos de la muestra: CRL 2688, CRL 618 y NGC 7027.

Especie	CRL 2688	CRL 618	NGC 7027
<sup>13</sup> CO .....	<1/25	1/20	<1/30
HCN .....	<1/30–1/100	1/10–1/1000	...
HNC .....	...	1/10–1/1000	...
H <sub>2</sub> O .....	...	1/25	<1/650
OH .....	...	1/1250	1/20
[OI] .....	...	4.5	875
CH <sup>+</sup> .....	...	...	1/80

## 7.9 CONCLUSIONES

En este capítulo se han analizado las observaciones de varias líneas rotacionales de CO realizadas con los IRAM-30 (milimétricas), CSO (submilimétricas) e ISO (IR-lejano), de tres CSEs carbonadas en diferentes etapas evolutivas: CRL 2688 (una PPNe joven), CRL 618 (una PNe) y NGC 7027 (una PNe joven). Además se ha estudiado el contenido molecular de los tres objetos mediante espectroscopia en el IR-lejano y se ha realizado un *survey* espectral en frecuencias (de 82 a 276 GHz) de CRL 618.

- El estudio de estos tres objetos en rápida transición entre las fases AGB y PNe muestra la importancia crucial que tienen para la química de la CSE:

(i) La interacción entre los vientos rápidos que aparecen en la fase de PPNe con los vientos más lentos formados con anterioridad en la etapa AGB.

(ii) El incremento del campo de radiación UV procedente del objeto central en su evolución hacia la fase de enana blanca.

- La evidencia espectroscópica del **aumento del flujo de fotones UV** es la aparición de líneas de estructura fina atómicas en el espectro de CRL 618. Estas líneas dominan posteriormente la emisión en el IR-lejano de NGC 7027. A la sensibilidad de los espectrómetros a bordo de ISO, las líneas de estructura fina aparecen cuando la temperatura de la estrella central es superior a  $\sim 10000$  K (Fong *et al.* 2001; Castro-Carrizo *et al.* 2001).
- Se ha observado en los perfiles de las líneas de CO que **la velocidad de los vientos moleculares va decreciendo paulatinamente** (deberá ser confirmado en una muestra más amplia de PPNe). Esto sugiere que **el efecto que tienen los frentes de choque sobre el remanente de CSE AGB disminuye con el grado de evolución del objeto próximo a la fase de PNe**. Obviamente, a partir de aquí los flujos de material dominantes serán los vientos de gas ionizado ( $v \simeq 1000$  km s<sup>-1</sup>) que recorren el interior de la nebulosa y que dejan su huella en la anchura de las líneas iónicas en el espectro ultravioleta y visible de las PNe.
- **El efecto de los choques es más pronunciado al final de la etapa AGB**, cuando se expelen grandes cantidades de material en forma de vientos rápidos. El remanente de envoltura AGB comienza a ser horadado por este viento interior que aparece durante la fase PPNe (*p.ej.*, el viento a  $\sim 200$  km s<sup>-1</sup> en CRL 618). Debido a la química rica en carbono, la presencia de choques favorecen la emisión de <sup>12</sup>CO, <sup>13</sup>CO y HCN. En el reprocesado del gas molecular durante la evolución post-AGB, la abundancia de <sup>13</sup>CO aumenta en la transición hacia la etapa de PNe. La estrella central eleva su temperatura efectiva en casi un orden de magnitud ( $T_{ef} \geq 30000$  K), provocando un cambio considerable en la química del interior de la CSE. **Las nuevas condiciones físicas (radiación UV y frentes choques) favorecen la formación de nuevas moléculas, tanto oxigenadas (OH y H<sub>2</sub>O), como moléculas carbonadas complejas (*p.ej.*, benceno).** Las especies dominantes durante la fase AGB (CO y HCN) son reprocesadas en las regiones fotodisociadas que se van formando en el interior de la CSE. Como consecuencia se produce *p.ej.*, una intensa emisión de HNC en la PDR. En este estado característico de una PPNe, las líneas de CO y [OI] son las mayores refrigeradoras del gas circunestelar.
- El *survey* espectral de CRL 618 permite conocer el contenido molecular (polar) de su CSE. **Las especies más abundantes en esta PPNe son los cianopoliinos, las cadenas acetilénicas, metano y los poliinos de metil.** Es decir, la fase de PNe puede caracterizarse también por la espectacular producción de moléculas orgánicas. Muchas de las líneas detectadas a 3 y 2 mm muestran perfiles P-Cygni. Estas líneas, procedentes en su mayoría de transiciones rotacionales de HC<sub>3</sub>N y HC<sub>5</sub>N, surgen en la PDR y en el anillo caliente interno que rodea al objeto central.



- Al alcanzar la fase de PNe, los vientos fuertes y rápidos han desaparecido casi por completo y una extensa envoltura molecular se expande lentamente alrededor de la región ionizadas y fotodisociadas del interior de la nebulosa. La mayoría de las especies moleculares de la fase AGB ya han sido reprocesadas. La emisión en el IR-lejano está ahora dominada por líneas de estructura fina atómicas e iónicas. A nivel molecular, las nuevas condiciones físicas (intenso flujo UV y elevadas temperaturas) favorecen la formación de especies como  $\text{CH}^+$  y CH. La emisión de HCN es mucho más débil en la fase de PNe, debido probablemente a la fotodisociación en CN y H. Más contradictoria es la desaparición del vapor de agua del espectro en el IR-lejano. Probablemente se trate de una especie intermedia en las CSEs carbonadas durante la fase de PPNe que se reprocesa antes de llegar a la etapa de PNe.

## Capítulo 8

# Nuevas Bandas Moleculares en el Infrarrojo Lejano

En este capítulo se profundiza en el estudio de los niveles vibracionales de baja energía de las cadenas lineales de carbono ( $C_n$ ) en el espacio, iniciado en el CAP. 4 con la primera detección de  $C_3$  en el ISM. El interés por estas especies es muy variado debido al papel que tienen en la química interestelar y circunestelar, y como posibles candidatos para la absorción/emisión en las bandas difusas interestelares (DIBs) y en las bandas IR sin identificar (UIBs).

La caracterización espectroscópica y estructural de las moléculas puras de carbono constituye un reciente campo de investigación dentro de la química. En los últimos años se ha avanzado notablemente en el conocimiento de estas especies, bien desde cálculos *ab initio* de alto nivel, bien mediante diversas técnicas experimentales que permiten obtener el espectro de ciertas cadenas  $C_n$  en el IR o en el UV-visible. La importancia de estos estudios ha alcanzado su cenit al otorgarse el premio Nobel a la investigación pionera en *fullerenos* ( $C_{60}$ ,  $C_{70}$ , ...).

Sin embargo, a pesar de los avances realizados en la caracterización de las especies que forman grandes estructuras tridimensionales, el conocimiento de las especies con menor número de átomos ( $n < 20$ ) es mucho más limitado en ciertos aspectos. Incluso se ha postulado que el conocimiento de las cadenas  $C_n$  es una función decreciente de  $n$  (Weltner & Van Zee 1989). Para una información detallada sobre las cadenas  $C_n$  puede consultarse los excelentes artículos de revisión por Weltner & Van Zee (1989) y Van Orden & Saykally (1998).

Paralelamente a los trabajos realizados para la determinación experimental o teórica del espectro electrónico y rovibracional de este tipo de especies, se ha propuesto la posibilidad de su detección en el espacio. En el rango espectral del IR-lejano observado por ISO tienen lugar los movimientos vibracionales de *flexión* de baja energía de algunas de las  $C_n$  más importantes. En este capítulo se presenta la primera detección tentativa de  $C_4$  en el espacio y se analiza la detección de  $C_3$  en IRC+10216.

### 8.1 LAS CADENAS LINEALES DE CARBONO $C_n$

La gran riqueza de la química orgánica se basa en la habilidad de los átomos de carbono para formar enlaces estables, sencillos, dobles y triples. Las posibilidades estructurales de estos enlaces, hacen que las especies ricas en carbono puedan adquirir una aparente infinidad de geometrías: cadenas lineales, anillos policíclicos y redes tridimensionales.

La hibridación *sp* de los átomos de carbono permite la formación de varios tipos de cadenas moleculares lineales. Por un lado las cadenas de tipo *acetilénico*, en las cuales se alternan enlaces sencillos y triples mediante estructuras  $[\cdot\text{C}(\equiv\text{C}-\text{C})_m\equiv\text{C}\cdot]$ , y por otro, las cadenas de tipo *cumulénico* con enlaces dobles equivalentes mediante estructuras del tipo  $[\text{:C}=(\text{C}=\text{C})_m=\text{C:}]$ . En una primera clasificación de las cadenas basadas en átomos de carbono-*sp*, están las cadenas *polares*, en cuyo grupo se encuentran los cianopoliinos  $\text{HC}_{2n+1}\text{N}$  (enlace acetilénico), las cadenas lineales  $\text{C}_n\text{H}$  (enlace acetilénico) y los cumulenos  $\text{C}_n\text{H}_2$  con  $n=\text{par}$  (enlace cumulénico). Estas especies han podido ser detectadas en el espacio mediante la observación de su espectro rotacional puro a longitudes de onda milimétricas. Las cadenas más largas detectadas de este tipo son  $\text{HC}_{11}\text{N}$  (Bell *et al.* 1997 y referencias en el citadas) y  $\text{C}_8\text{H}$  (Cernicharo & Guélin 1996a).

Sin embargo existe otro conjunto de especies *no polares* sin espectro rotacional puro y que no pueden ser detectadas desde radiotelescopios terrestres. En este grupo se encuentran las especies con silicio del tipo  $\text{SiC}_n\text{Si}$  y las cadenas puras de carbono  $\text{C}_n$ .

### LAS CADENAS $\text{C}_n$ : ESTRUCTURA Y ESPECTROSCOPIA

Una de las propiedades más sobresalientes de las cadenas puras de carbono  $\text{C}_n$  más largas es la presencia de dos isómeros (uno lineal y otro cíclico) en las cadenas con número par de átomos. A pesar de que la energía de las dos configuraciones es similar, las formas cíclicas son mucho más difíciles de detectar y caracterizar espectroscópicamente. Esto puede deberse a su configuración más compacta que hace que los momentos dipolares asociados sean menores que en el isómero lineal o también debido a su escasa producción en los dispositivos experimentales. De aquí en adelante nos interesaremos sólo en los isómeros lineales.

En los primeros cálculos *ab initio* de Pitzer & Clementi (1959) se encontró que el enlace más estable en las cadenas  $\text{C}_n$  con  $n < 10$  era de tipo *cumulénico*. Además, se diferenciaron por primera vez las  $\text{C}_n$  con  $n=\text{impar}$  y aquellas con  $n=\text{par}$ . Las cadenas con un número impar de átomos de carbono tienen ocupados sus últimos orbitales moleculares y por tanto poseen un nivel electrónico fundamental  $^1\Sigma_g^+$ , mientras que las cadenas con un número par de átomos ocupan los últimos orbitales moleculares con dos electrones de espines paralelos, lo que resulta en un nivel electrónico fundamental  $^3\Sigma_g^-$  (FIG. 8.1). El conocimiento que se tiene sobre los niveles electrónicos excitados de estas especies es más limitado que para el fundamental.

La propiedad más significativa para el presente estudio es la inusual amplitud de los movimientos de *flexión* de las cadenas  $\text{C}_n$ , lo que resulta en unas frecuencias para el modo de vibración asociado relativamente bajas ( $\leq 200\text{ cm}^{-1}$ ,  $\geq 50\text{ }\mu\text{m}$ ). Como hemos visto en el CAP. 4, el caso más extremo es precisamente el carbono triatómico. Sin embargo, la presencia de los modos de vibración de baja energía en el IR-lejano dificulta su observación y caracterización en laboratorios terrestres mediante experimentos en matrices de gases inertes y espectroscopia convencional porque la cantidad necesaria de moléculas es complicada de preparar. De hecho, los únicos espectros observados en el laboratorio de modos de vibración de baja energía son el modo  $\nu_2$  de  $\text{C}_3$  a  $63.4\text{ cm}^{-1}$  ( $\sim 157\text{ }\mu\text{m}$ ; Schmuttenmaer *et al.* 1990) y el  $\nu_5$  de  $\text{C}_4$  a  $172.4\text{ cm}^{-1}$  ( $\sim 58\text{ }\mu\text{m}$ ; Withey *et al.* 1991). La baja frecuencia del modo de *flexión* de  $\text{C}_3$  puede deberse a las peculiares características de los últimos orbitales moleculares ocupados de simetría  $\pi_u$  y que forman una unión enlazante cuando la molécula se dobla sobre su centro de simetría (el átomo central). Esto favorece el modo de *flexión* y reduciendo su frecuencia. En el caso de los últimos orbitales moleculares de  $\text{C}_4$  ( $\pi_g$ ), se favorece una unión antienlazante, lo cual hace que sea una especie aparentemente menos *flexible* en comparación con  $\text{C}_3$ .

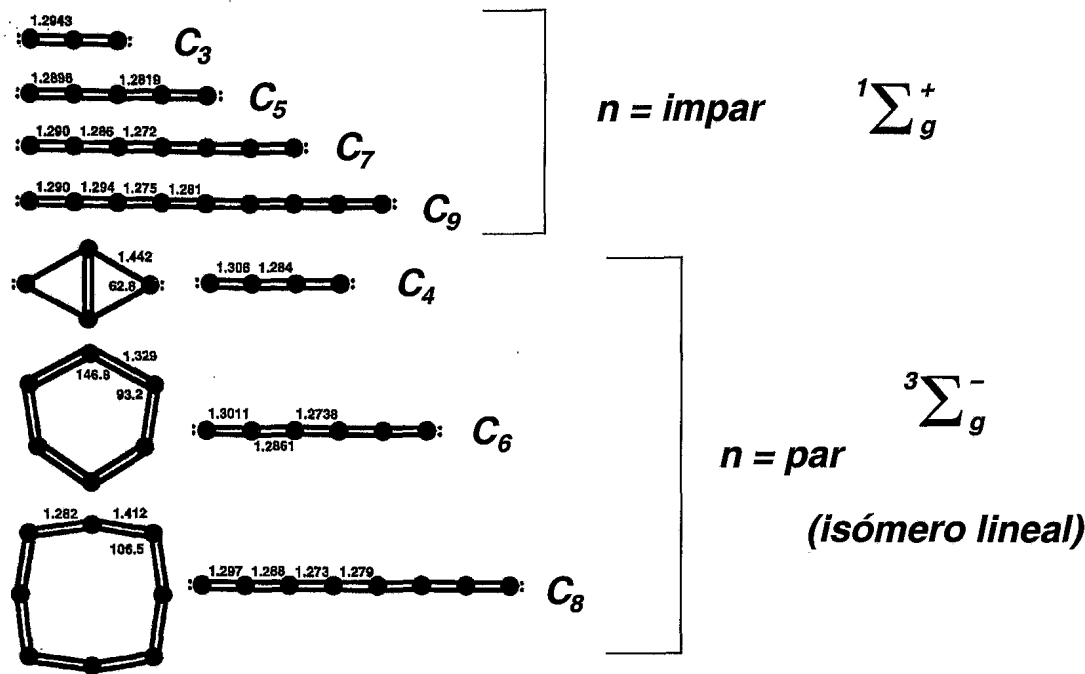


FIGURA 8.1: Geometría de algunas cadenas  $C_n$  en su configuración de baja energía. Se indica las longitudes (en amstrongs) y los ángulos de enlace (en grados) derivadas de cálculos *ab initio* de diferente nivel para cada especie (adaptada de Van Orden & Saykally 1998).

## RELACIÓN CON LAS DIBs Y LAS UIBs

Además del interés intrínseco que supone para la Física Molecular la detección astronómica de las cadenas  $C_n$ , la determinación de su abundancia y características espectrales puede ayudar a resolver algunos de los problemas astrofísicos más antiguos relacionados con la espectroscopia en el visible e IR.

Las *bandas difusas interestelares* (DIBs) son un conjunto de líneas espectrales, todavía sin asignar, observadas entre 4000 y 8500 Å en el espectro de absorción de las nubes interestelares difusas. Algunos de los candidatos sugeridos son los radicales (probablemente cationes) de *hidrocarburos aromáticos policíclicos* (PAHs) (Léger *et al.* 1995) y cadenas de hidrocarburos insaturados (Fulara *et al.* 1993). Sin embargo aún no se han obtenido ajustes reales entre un espectro astronómico y otro de alguna de estas especies sintetizada en el laboratorio a baja temperatura y en fase gaseosa. El origen (molecular) de las DIBs sigue sin estar establecido.

Por otro lado, Douglas (1977) propuso que las especies  $C_n$  podrían ser las responsables de las DIBs, a través de sus bandas electrónicas. En particular se ha sugerido que  $C_{60}^+$  fuera el responsable mayoritario (Foing & Ehrenfreund 1994). Las cadenas lineales  $C_n$  de menor número de átomos también podrían contribuir a las DIBs, pero hasta la detección de  $C_3$  en Sgr B2 presentada en el CAP. 4 nada se sabía de su posible presencia en el ISM. Como ya se ha dicho, un año después de este descubrimiento también se detectó la banda electrónica  $A^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  de  $C_3$  a  $\sim 4050$  Å en el ISM difuso (Maier *et al.* 2001). Estas detecciones confirman que efectivamente las cadenas más pequeñas ( $C_2$  y  $C_3$  de momento) pueden ser abundantes en el ISM difuso y obligan a estudiar el espectro electrónico de otras cadenas  $C_n$  en fase gaseosa. La espectroscopia vibracional en el IR-lejano de los modos de *flexión* de estas especies es el complemento ideal para determinar su abundancia en el mayor número de fuentes astronómicas posible.

Complementariamente, existe otra familia de estructuras espectrales en el IR sin asignar a ninguna especie particular y que también se observan de forma ubicua en multitud de fuentes. Estas estructuras se conocen por *bandas infrarrojas sin identificar* (UIBs) y las más significativas aparecen a 3.3, 3.4, 6.2, 7.7, 8.6, y 11.3  $\mu\text{m}$ . Existe un consenso mayoritario en que la emisión observada procede de la des-excitación vibracional de macro-moléculas en fase gaseosa de tipo PAH (*p.ej.*, Joblin *et al.* 1995). Además se han propuesto candidatos en estado sólido (granos de polvo carbonáceos) en donde la emisión procedería de grupos funcionales solapados al esqueleto sólido (*p.ej.*, Papoular 1999).

Las observaciones con ISO han aumentado las detecciones de estas líneas en diversos entornos astronómicos pero también han incrementado el catálogo de UIBs. En particular, el estudio sistemático realizado en este trabajo de numerosas fuentes planetarias, nubes moleculares y estrellas evolucionadas con el LWS ha permitido encontrar ciertas bandas sin identificar en el IR-lejano que se repiten en distintos objetos. La asignación de estas bandas es complicada ya que el espectro de laboratorio en el IR-lejano de las especies moleculares que se creen candidatas aún no ha sido obtenido. Incluso se da el caso de que las constantes moleculares fundamentales de estas especies tampoco se conocen con exactitud, lo cual imposibilita el cálculo exacto de las longitudes de onda asociadas a los modos observados. En particular, se piensa que los modos de vibración de baja energía de las cadenas lineales  $C_n$  más pequeñas aparecen en el rango observado por el LWS. En la SEC. 8.3 se presenta la primera asignación tentativa de una de estas bandas a  $\sim 58 \mu\text{m}$  al modo  $\nu_5$  de  $C_4$ . La detección definitiva de estas especies en el espacio, ayuda además a establecer el papel que cumplen las cadenas  $C_n$  en la formación de los constituyentes macro-moleculares ricos en carbono responsables del resto de UIBs.

## 8.2 DETECCIÓN DE $C_3$ EN IRC+10216

El carbono triatómico es la cadena  $C_n$  mas simple con un número impar de átomos y la primera en detectarse en colas cometarias a través de su emisión electrónica en la banda  $A^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  (Douglas 1951). El espectro vibracional puede caracterizarse por la presencia de tres modos vibracionales ( $\nu_1$ ,  $\nu_2$ ,  $\nu_3$ ). El modo simétrico de *tensión*  $\nu_1$  es inactivo IR y sólo produce transiciones *Raman*, mientras que el modo antisimétrico de *tensión*  $\nu_3$  si tiene transiciones dipolares permitidas. Finalmente, el modo  $\nu_2$ , es un modo de *flexión* de muy baja energía ( $63.4 \text{ cm}^{-1}$  [ $157.7 \mu\text{m}$ ] para el origen de la banda).

El  $C_3$  fue descubierto en la envoltura de la estrella evolucionada IRC+10216 a través de su modo de *tensión*  $\nu_3$  a  $\sim 5 \mu\text{m}$  (Hinkle *et al.* 1988), en el ISM denso a través de su modo de *flexión*  $\nu_2$  en el IR-lejano (SEC. 4.6) y en el ISM difuso a través de la absorción producida por su banda electrónica fundamental (Maier *et al.* 2001). La menor energía de excitación del modo  $\nu_2$  le hace el más interesante para la detección de  $C_3$  en nubes interestelares y circunestelares.

### EL MODO DE VIBRACIÓN DE BAJA ENERGÍA $\nu_2$ DE $C_3$

La baja frecuencia observada del modo  $\nu_2$  (Schmuttenmaer *et al.* 1990) sugiere que  $C_3$  posee unos movimientos de *flexión* anarmónicos muy amplios. Tanto, que la intensidad del modo  $\nu_2$  es similar a la intensidad del modo  $\nu_3$  de *tensión*. La transición  $(0, 1^1, 0) \leftarrow (0, 0^0, 0)$  muestra un espectro *perpendicular* con bandas  $-P$ ,  $-Q$  y  $-R$  característico de una transición con carácter vibrónico  $^1\Pi - ^1\Sigma$ . La presencia de tres bandas rovibracionales se debe a que el

nivel vibracional (0,0,0) (simetría vibrónica  $\Sigma^+$ ) contiene solo niveles rotacionales con  $J$ -par, mientras que el nivel (0,1<sup>1</sup>,0) (simetría vibrónica  $\Pi_u$ ) contiene todos los niveles- $J$ , pudiendo existir transiciones permitidas  $\Delta J = 0, \pm 1$ . En esta sección se presenta y analiza la primera detección del modo  $\nu_2$  de C<sub>3</sub> en una envoltura circunestelar carbonada, IRC+10216. Véase la SEC. 4.6 para su detección en en la nube del ISM Sgr B2.

### 8.2.1 OBSERVACIONES Y RESULTADOS

Las dos líneas rovibracionales detectadas en IRC+10216 fueron observadas con el LWS/FP en el modo LWS04 (TDT 20100401) con un total de 45 *scans*. Los espectros fueron analizados interactivamente con ISAP. La versión original procede de la versión del archivo OLP 7.0, aunque también se ha analizado la versión más reciente. La calibración del flujo del continuo en el FP se ha realizado utilizando como referencia el flujo del continuo medido por el *grating*. Posteriormente se ha sustraído una línea de base polinómica. Los espectros resultantes fueron suavizados con dos canales por cada elemento de resolución (0.015  $\mu\text{m}$ ).

La FIG. 8.2 muestra las líneas R(2) y R(4) detectadas. Las líneas están centradas a la velocidad de la fuente ( $-26.5 \text{ km s}^{-1}$ ). El flujo de cada línea es similar ( $\sim 0.8 \times 10^{-17} \text{ W cm}^{-2}$ ). La contribución de estas líneas al espectro *grating* será del orden de  $\sim 2 \times 10^{-19} \text{ W cm}^{-2}$ , en buen acuerdo con la emisión en la banda-Q (que contiene las líneas Q(2), Q(4), Q(6), Q(8) y R(0)) detectada en el espectro *grating* a  $\sim 157 \mu\text{m}$  (FIG. 7.12; Cernicharo *et al.* 1996b). Es muy probable que otras líneas de las bandas -P, -Q y -R de C<sub>3</sub> estén presentes en el espectro *grating* de IRC+10216 pero a la limitada resolución espectral y los efectos producidos por la reducción de los datos al sustraer una línea de base impiden cualquier otra identificación. Sin embargo, las líneas R(2) y R(4) presentadas en la FIG. 8.2 confirman definitivamente la presencia de líneas rovibracionales del modo (0,1<sup>1</sup>,0)  $\leftarrow$  (0,0<sup>0</sup>,0) de C<sub>3</sub>.

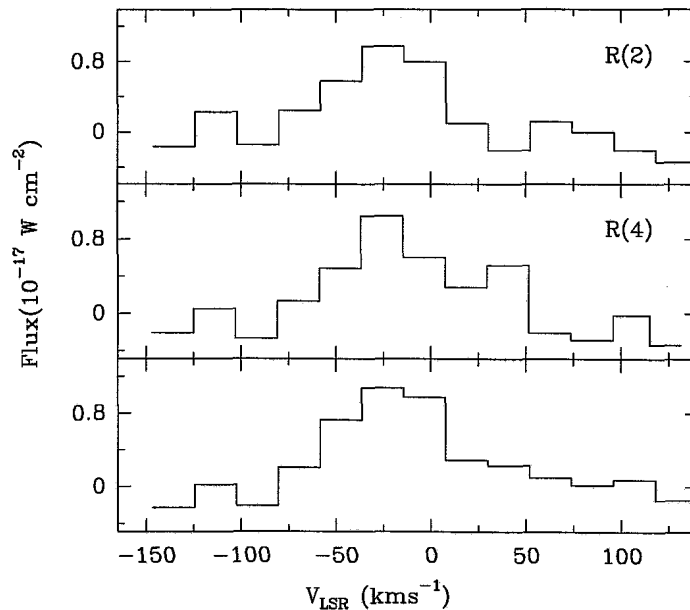


FIGURA 8.2: Líneas R(2) (superior) y R(4) (en medio) de C<sub>3</sub> observadas con el LWS/FP en IRC+10216. El panel inferior muestra el promedio de las dos líneas. La abscisa corresponde a la velocidad LSR (en  $\text{km s}^{-1}$ ) y la ordenada al flujo de línea (en  $10^{-17} \text{ W cm}^{-2}$ ).

### 8.2.2 DISCUSIÓN

El flujo de fotones en el IR-medio procedente de las capas más internas de IRC+10216 puede ser suficientemente elevado para poblar el nivel  $(0, 1^1, 0)$  por absorción radiativa desde el nivel vibracional fundamental  $(0, 0, 0)$  hasta niveles excitados  $(0, \nu_2^l, 0)$ , e incluso hasta el modo de *tensión*  $\nu_3$ . Posteriormente estos niveles pueden decaer en cascada radiativa. Sin embargo, no se conocen los momentos dipolares ni las constantes espectroscópicas para la mayoría de las transiciones posibles. Por tanto, es imposible realizar un modelo exacto de la excitación del carbono triatómico que incluya todas las transiciones vibracionales posibles dadas las condiciones físicas de la envoltura de IRC+10216. Una situación similar se ha encontrado en la transición fundamental y sobretonos del modo de *flexión* de  $C_4H$  (Guélin *et al.* ; Yamamoto *et al.* 1987).

El cociente de intensidades  $R(4)/R(2)$  observado es  $\sim 1$  lo que indica que la temperatura de excitación es próxima a 30 K. Esta temperatura es similar a la encontrada en IRC+10216 en otras especies moleculares (*p.ej.*, Guélin *et al.* 1987).

Para poder estimar la densidad de columna de  $C_3$  en la envoltura se ha utilizado un modelo LVG que incluye los niveles rotacionales hasta  $J_{up}=20$  del nivel fundamental y del nivel vibracional  $\nu_2=1$ . Se ha asumido que la emisión observada del modo de *flexión* surge de una envoltura esférica con  $15''$  de radio, similar al encontrado por Guélin *et al.* (1993) para la emisión de las cadenas lineales radicales  $C_nH$ . Los coeficientes colisionales empleados son los mismos que los utilizados en el modelo no-local de la absorción de  $C_3$  en Sgr B2 (SEC. 4.6). Es decir, los de la molécula OCS (Green & Chapman 1978) para transiciones dentro de un nivel vibracional y divididas por un factor 10 para transiciones entre el nivel  $(0, 0, 0)$  y el nivel  $(0, 1^1, 0)$ . Los primeros modelos realizados indicaban, sin embargo, que las densidades requeridas para que las colisiones poblaran apreciablemente los niveles rovibracionales eran muy altas ( $n(H_2) \geq 10^6 \text{ cm}^{-3}$ ). La inclusión de un campo de radiación IR procedente de una fuente central reduce la densidad de gas necesaria para la excitación de los niveles a  $\sim 3 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ . Para reproducir los flujos de la FIG. 8.2 y las observaciones *grating* (Cernicharo *et al.* 1996b) se ha encontrado que la densidad de columna de  $C_3$  necesaria es  $\sim 2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ . Los modelos efectuados indican efectivamente que la excitación de la molécula en IRC+10216 está controlada por la absorción de fotones IR.

Para una densidad de columna total  $N(H_2)=2 \times 10^{22} \text{ cm}^{-2}$ , la abundancia de  $C_3$  es de  $10^{-6}$ . Este resultado está de acuerdo con la abundancia derivada por Hinkle *et al.* (1988) a partir del análisis del modo de *tensión*  $\nu_3$  de  $C_3$ . Con el complemento de las observaciones en *mimilétricas* de  $C_4H$ , se obtiene un cociente de abundancias  $C_3/C_4H \simeq 4$ . Los modelos químicos de Cherchneff & Glassgold (1993) predicen  $\chi(C_3) \simeq 10^{-7}$  en las capas más externas de las CSEs y una abundancia 10 veces mayor para  $C_4H$ . Los resultados aquí presentados sugieren una abundancia de  $C_3$  mucho mayor a la esperada por los modelos teóricos. La inclusión de la fotodisociación de especies poliatómicas carbonadas en los modelos químicos probablemente ayude a reconciliar los dos valores.

En cualquier caso, nótese que el tratamiento utilizado del transporte radiativo para el modo de *flexión* de  $C_3$  es bastante simple. Sin embargo, los modelos no se pueden mejorar hasta que se incluyan de forma adecuada las transiciones a los niveles vibracionales excitados. Para ello, se necesitan las constantes moleculares y los momentos dipolares procedentes de datos experimentales en el laboratorio o de cálculos *ab initio*.

## 8.3 PRIMERA DETECCIÓN TENTATIVA DE C<sub>4</sub>

En esta sección se presenta y analiza una *banda infrarroja sin identificar* a 57.5  $\mu\text{m}$  (174  $\text{cm}^{-1}$ ) en varias envolturas de estrellas evolucionadas y en Sgr B2. Debido a la química de estos objetos, lo más probable es que el responsable de la emisión/absorción sea una cadena lineal de carbono. Analizando los datos experimentales en confinamiento de matrices y los últimos cálculos *ab initio* se ha asignado la banda de forma tentativa al modo de *flexión*  $\nu_5$  del carbono tetra-atómico (C<sub>4</sub>). La asignación definitiva a C<sub>4</sub> depende de la determinación exacta de algunas de sus constantes moleculares básicas. De confirmarse, estas observaciones constituirían la primera detección de la especie C<sub>4</sub> en el espacio.

### 8.3.1 INTRODUCCIÓN

Hace tiempo que las cadenas de carbono polares como C<sub>5</sub>H, C<sub>6</sub>H, C<sub>7</sub>H, C<sub>8</sub>H, H<sub>2</sub>C<sub>3</sub> y H<sub>2</sub>C<sub>4</sub> fueron descubiertas en el ISM y CSM observando su espectro rotacional puro en milimétricas (Cernicharo *et al.* 1986; 1987; Guélin *et al.* 1987; 1997; Cernicharo & Guélin 1996a).

Por otro lado, poliiinos como C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, C<sub>4</sub>H<sub>2</sub> y C<sub>6</sub>H<sub>2</sub>, y el benceno, la unidad aromática fundamental, han sido detectadas en la PPNe CRL 618 (Cernicharo *et al.* 2001a; 2001b), apoyando la idea de que moléculas carbonadas mucho más complejas pueden formarse eficientemente. Sin embargo, los mecanismos que permiten el *crecimiento* de las moléculas orgánicas en el espacio todavía son poco conocidos. Además, el conjunto completo de especies que pueden participar en las reacciones químicas que forman moléculas orgánicas complejas tiene que ser todavía identificado. De entre todas las *unidades constructivas* moleculares, las cadenas puras de carbono C<sub>n</sub>, han atraído recientemente el interés de espectroscopistas experimentales y de astrónomos por su reactividad y posible presencia en multitud de reacciones intermedias.

Las especies de este tipo detectadas en el espacio aún son pocas. El carbono triatómico ha sido detectado en atmósferas de estrellas frías en el visible (*p.ej.*, Zuckerman *et al.* 1976) y en la CSE de IRC+10216 a través de su modo de *tensión*  $\nu_3$  (Hinkle *et al.* 1988) y de su modo de *flexión*  $\nu_2$  (SEC. 8.2), la abundancia estimada de C<sub>3</sub> en esta fuente  $\sim 10^{-6}$ . Además, recientemente se ha detectado en el ISM denso (SEC. 4.6) y en el ISM difuso (Maier *et al.* 2001). Finalmente, el carbono penta-atómico ha sido detectado también en la CSE de IRC+10216 con un cociente de abundancias C<sub>3</sub>/C<sub>5</sub>  $\simeq 10$  (Bernath *et al.* 1989). Menos se conoce sobre la presencia de cadenas C<sub>n</sub> con *n*-par, pero especies como C<sub>4</sub> podrían ser también abundantes en estrellas evolucionadas carbonadas y en el ISM. En esta sección se presenta la detección de un conjunto de líneas a  $\sim 57.5 \mu\text{m}$  que se asignan de forma tentativa al modo de *flexión*  $\nu_5$  de C<sub>4</sub>. La banda sin identificar ha sido observada en Sgr B2, IRC+10216, CRL 2688, CRL 618 y NGC 7027. Alternativamente se discute la posibilidad de que emisión/absorción proceda de otra cadena carbonada, C<sub>4</sub>H, aunque los experimentos más recientes en el laboratorio sugieren que su modo de *flexión* de más baja energía está situado a frecuencias más elevadas (Taylor *et al.* 1998).

### 8.3.2 OBSERVACIONES Y RESULTADOS

Como parte de nuestras propuestas de tiempo abierto para observaciones con *ISO*, se han buscado los modos de *flexión* de baja energía de ciertas especies poliatómicas utilizando el LWS. La fuente principal para esta búsqueda ha sido IRC+10216. Las observaciones *grating* de IRC+10216 han sido analizadas y modeladas por Cernicharo *et al.* (1996b). Los datos han



sido reprocesados con la versión más moderna del archivo IDA (TDT 19800158). Las diferencias con los datos ya publicados son escasas. Después de identificar todas las líneas de HCN (en el estado vibracional fundamental y primeros excitados) y las líneas rotacionales de CO, el espectro muestra un conjunto de líneas sin identificar (panel superior de la FIG. 8.3) entre 56 y 58  $\mu\text{m}$ .

Se han estudiado todas las transiciones rotacionales de especies ligeras que pueden ser potencialmente abundantes en la CSE. Sin embargo, la banda observada no ha podido asignarse a ninguna especie conocida, y tampoco se han encontrado estructuras espectrales parecidas en el propio espectro ISO/LWS de IRC+10216. La última explicación es que la banda pertenezca al modo de *flexión* de una molécula pesada y abundante. Además, se ha buscado esta misma banda en otros objetos siguiendo el mismo criterio que el empleado en la detección de C<sub>3</sub>, C<sub>4</sub>H<sub>2</sub>, C<sub>6</sub>H<sub>2</sub> y benceno, es decir las fuentes: IRC+10216, CRL 618, CRL 2688, NGC 7027 y Sgr B2.

Para Sgr B2(M) se han utilizado los TDTs 28701401, 287012130, 287012131 y 49400302. Todos juntos representan 32 *scans* individuales. El resultado del análisis es que la banda a 57.7  $\mu\text{m}$  también está presente en el ISM. Además, existe un número elevado de otras observaciones LWS L01 de la misma posición pero con un número más limitado de *scans*. Para estar seguros de la detección, se han inspeccionado todos ellos, y otra vez, la banda aparece individualmente en todos ellos. Sgr B2(N) fue observado en el transcurso de un cartografiado rápido de todo el complejo de Sgr B (CAP. 5). El espectro de esta posición sólo tiene 4 *scans*.

Para NGC 7027 se han utilizado todas las observaciones LWS L01 realizadas por ISO (véase la SEC. 7.2 para más detalles). Los datos de CRL 618 (TDTs 68800302 y 68800450) y de CRL 2688 (TDT 02101505) son también los utilizados en el CAP. 7.

Todos los espectros del detector SW2 se han analizado utilizando el paquete interactivo ISAP. Los datos proceden de la versión OLP 9.0 del archivo IDA. A cada uno se le sustrajo una línea de base polinómica. Para alguna de las fuentes estudiadas, este es un proceso crítico en la determinación del perfil e intensidad de la banda sin identificar. Debido a la densidad de líneas moleculares en los espectros de Sgr B2(M,N), la determinación precisa del nivel de continuo no es sencilla. Para las fuentes donde la banda aparece en emisión (estrellas evolucionadas) la determinación de la línea de base es menos crítica pero el comportamiento global del detector SW2 no sigue el perfil esperado para la emisión del continuo. En estos casos se tuvo que sustraer un polinomio de orden 4 después de eliminar del espectro las líneas por encima de  $5\sigma$ .

La FIG. 8.3 muestra el espectro resultante de todas los objetos seleccionados entre 53 – 62  $\mu\text{m}$ . Complementariamente se ha analizado el mismo intervalo espectral de varias estrellas evolucionadas ricas en oxígeno, Orión, Sgr A, nubes moleculares con suficiente flujo en el IR-lejano y Marte para comprobar la posibilidad de que la estructura observada fuera un efecto instrumental. Ninguno de estos objetos mostraba la banda a 57.5  $\mu\text{m}$ . Además, se ha investigado la posibilidad de contribuciones instrumentales a la forma de la banda examinando la respuesta espectral del filtro del detector SW2. Tampoco se ha encontrado ningún efecto reseñable a esas longitudes de onda (P. García-Lario, comunicación privada). Se concluye pues que la banda observada en IRC+10216, CRL 2688, CRL 618, NGC 7027 y Sgr B2 es real.

En el espectro de IRC+10216 (FIG. 8.3) se han indicado las líneas rotacionales puras de CO y HCN. El modelo de su emisión (Cernicharo *et al.* 1996b) predice poco flujo para estas líneas de *J*-alto. Sólo en IRC+10216 algunas líneas de CO (*J*=43–42, 44–43 y 45–44) están marginalmente detectadas a un nivel de  $3\sigma$ .

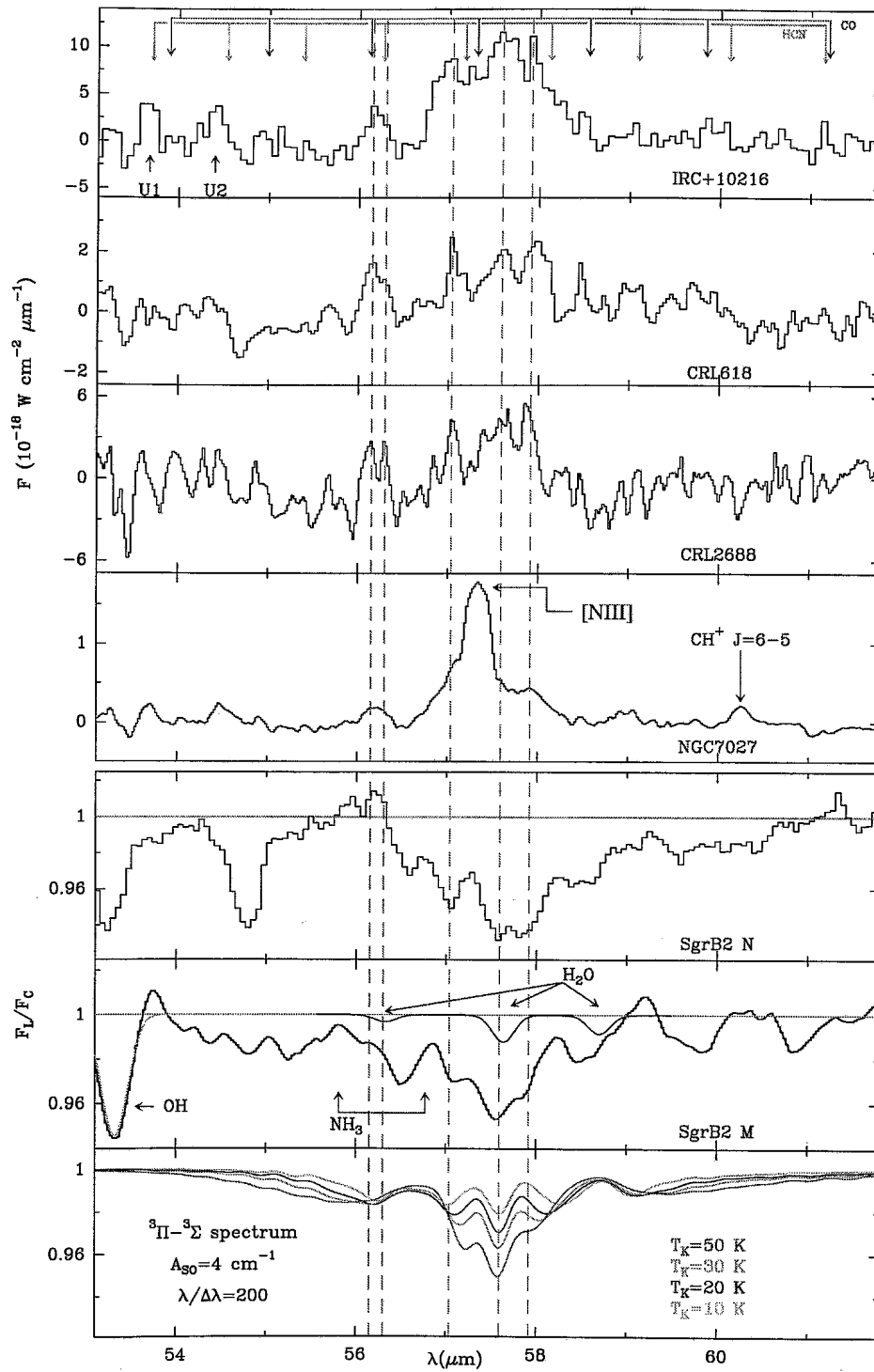


FIGURA 8.3: Espectro entre 53–62  $\mu\text{m}$  de los objetos en los que se ha detectado la banda a 57.5  $\mu\text{m}$ . Las longitudes de onda de las líneas de CO  $J=43-42$  a  $J=49-48$ , y las de HCN de  $J=56-55$  a  $J=64-63$  se indican mediante flechas en el panel superior. La emisión del continuo ha sido sustraída de los espectros de IRC+10216, CRL 2688, CRL 618 y NGC 7027, mientras que en Sgr B2 se ha normalizado al flujo del continuo. El panel inferior muestra la banda esperada para una transición vibracional  $^3\Pi-^3\Sigma$  con una constante spin-órbita  $A_{SO} = 4 \text{ cm}^{-1}$ , una anchura intrínseca de  $10 \text{ km s}^{-1}$ , y una resolución espectral similar a la del LWS,  $\lambda/\Delta\lambda=200$ .

La banda sin identificar consiste de al menos 4 líneas espectrales o sub-bandas (a 57.0, 57.6, 57.9 y 58.2  $\mu\text{m}$ ). Existe otra estructura a 56.15  $\mu\text{m}$  detectada en las CSEs carbonadas pero que es menos evidente en los espectros de Sgr B2. La contribución de línea  $J=47-46$  de CO es bastante débil en IRC+10216. En Sgr B2 esta estructura puede estar solapada con la absorción producida por la línea  $J=9-8$  de  $\text{NH}_3$ . Además, la línea o sub-banda a 56.2  $\mu\text{m}$  puede ser la línea de estructura fina  $[\text{SI}] \ ^3P_0 - ^3P_1$  a 56.3  $\mu\text{m}$ , pero su compañera  $[\text{SI}] \ ^3P_1 - ^3P_2$  a 25.2  $\mu\text{m}$  está ausente en todos los objetos. Por último, la línea puede corresponder a la transición R(1) de HD, sin embargo, no sería muy probable encontrar una intensidad tan elevada de una línea de HD en un objeto evolucionado. Por tanto, sólo queda la posibilidad de que banda observada sea un efecto instrumental que surge del planeta utilizado como calibrador de los detectores LWS (Urano). El argumento en contra de este efecto es que su flujo varía en más de un factor 10 entre NGC 7027 y IRC+10216 o CRL 618. El flujo en el continuo de NGC 7027 y CRL 618 es prácticamente el mismo,  $1.15 \times 10^{-16}$  y  $0.7 \times 10^{-16} \text{ W cm}^{-2} \mu\text{m}^{-1}$ , respectivamente y en IRC+10216 y CRL 2688 es de 4 y  $3 \times 10^{-16} \text{ W cm}^{-2} \mu\text{m}^{-1}$ , respectivamente. Por tanto, la emisión observada a 56.2  $\mu\text{m}$  en las estrellas evolucionadas no puede ser explicada únicamente como un efecto instrumental procedente del calibrador. En la FIG. 8.3 se muestra que la intensidad de esta emisión sigue el patrón observado de las otras sub-bandas. En lo que sigue, se considera que todas ellas pertenecen a la misma banda molecular.

También se han observado otras dos líneas a 53.7 y 54.4  $\mu\text{m}$  en IRC+10216 (etiquetadas como U1 y U2), que se detectan en NGC 7027 pero no en los otros objetos. De momento permanecen sin identificación. En Sgr B2, la contribución de OH (SEC. 4.5) y del vapor de agua (SEC. 4.4) se indica en el panel correspondiente a Sgr B2(M). La contribución de  $\text{H}_2\text{O}$  al espectro de CRL 618 a 58  $\mu\text{m}$  es prácticamente despreciable (véase la SEC. 7.6).

### 8.3.3 DISCUSIÓN : ¿ $\text{C}_4\text{H}$ ? ¿ $\text{C}_4$ ?

La detección de la banda a  $\sim 57.5 \mu\text{m}$  en todos los objetos post-AGB ricos en carbono indica hacia a una molécula orgánica con responsable de la emisión/absorción. De entre todas las posibles candidatas, varias especies con cuatro átomos pesados poseen modos de *flexión* de baja energía en el intervalo espectral 45.5–62.5  $\mu\text{m}$  ( $160\text{--}220 \text{ cm}^{-1}$ ).  $\text{HC}_3\text{N}$  tiene su modo de *flexión*  $\nu_7$  a  $\sim 45 \mu\text{m}$  ( $222.4 \text{ cm}^{-1}$ ). El diacetileno ( $\text{C}_4\text{H}_2$ ), recientemente detectado en CRL 618 con una gran abundancia (Cernicharo *et al.* 2001a; 2001b), tiene otro modo de *flexión* de baja energía a  $\sim 45 \mu\text{m}$ . Otro ejemplo significativo es  $\text{C}_4\text{H}$  cuyas líneas rotacionales puras en su modo de *flexión* de más baja energía  $\nu_7$  y en sus sobretonos [ $2\nu_7$ ,  $l=0(\Sigma)$  y  $2(\Delta)$ ] han sido detectadas en IRC+10216 (Guélin *et al.* 1987; Yamamoto *et al.* 1987).

Los cálculos *ab initio* estiman que la longitud de onda del origen de la banda del modo  $\nu_7$  de  $\text{C}_4\text{H}$  está alrededor de  $\sim 56 \mu\text{m}$  ( $178 \text{ cm}^{-1}$ ; Graf *et al.* 2001). Por su parte, Yamamoto *et al.* (1987) estimaron la constante del desdoblamiento- $l$ ,  $q_7$ , de los niveles vibracionales  $\nu_7=1$  y 2, a partir de la cual derivaron la longitud de onda del origen de la banda del modo  $\nu_7$  a  $\sim 76 \mu\text{m}$  ( $131 \text{ cm}^{-1}$ ). El error en este cálculo es del 20 % (Mikami *et al.* 1989). Sin embargo, el espectro de  $\text{C}_4\text{H}^-$  observado en el laboratorio sugiere una longitud de onda menor  $\sim 44 \mu\text{m}$  ( $226 \text{ cm}^{-1}$ ; Taylor *et al.* 1998). Además, el nivel electrónico excitado  $^2\Pi$  de  $\text{C}_4\text{H}$  esta sólo  $\sim 670 \text{ K}$  ( $\sim 468 \text{ cm}^{-1}$ ) por encima del fundamental  $X^2\Sigma$ . Las dos posibles transiciones (la vibracional  $\nu_7=1-0$  y la electrónica  $A^2\Pi - X^2\Sigma$ ) aparecen en el rango espectral observado por el espectrómetro SWS a bordo de ISO.

Sin embargo, el flujo de IRC+10216 en el IR-medio es tan elevado que el rango espectral esperado para esas transiciones está contaminado por interferencias y aún no se han asignado ninguna identificación (véase Cernicharo *et al.* 1999b).

La forma de la banda mostrada en la FIG. 8.3 permite descartar que esté producida por una transición vibracional  $^1\Pi - ^1\Sigma$ , *p.ej.*, los modos de *flexión* de HC<sub>3</sub>N, HC<sub>5</sub>N, C<sub>n</sub>H con *n*-par y C<sub>n</sub> con *n*-impar. Todas estas especies moleculares tienen un nivel electrónico fundamental  $^1\Sigma$  y dada la baja resolución espectral del LWS en su modo *grating*, sus modos de *flexión* se observarían como una rama-*Q* muy intensa y ramas -*R* y -*P* más débiles. Los modos  $\nu_7$  de HC<sub>3</sub>N y  $\nu_9$  de C<sub>4</sub>H<sub>2</sub> (aún no publicados) han sido detectados en el espectro LWS de CRL 618 y satisfacen estas expectativas y propiedades.

Dada la alta abundancia de C<sub>3</sub> en Sgr B2 (SEC. 4.6) y en IRC+10216 (SEC. 8.2) se ha analizado la posibilidad de que la banda observada corresponda al modo de *flexión*  $\nu_5$  de baja energía de C<sub>4</sub>. El carbono tetra-atómico posee un isómero lineal que debido al número par de átomos de carbono tiene un estado electrónico fundamental  $^3\Sigma_g^-$ . El C<sub>4</sub> lineal fue observado por primera vez en el laboratorio mediante resonancia de spines electrónicos de moléculas carbonadas en matrices (Graham *et al.* 1976). Estos autores determinaron las constantes del acoplamiento-spin ( $\lambda$ ) y desdoblamiento-spin ( $\gamma$ ) en el nivel vibracional fundamental. Posteriormente fue detectado y caracterizado en fase gaseosa por Heath & Saykally (1991) que observaron varias líneas rovibracionales del modo de *tensión* antisimétrico  $\nu_3$ . Moazzen-Ahmadi *et al.* (1994), observaron el mismo modo y la *banda caliente*  $\nu_3 + \nu_5 - \nu_5$ , lo que permitió determinar las constantes rotacionales *B* y *D* para el nivel fundamental y los niveles vibracionales del modo  $\nu_5$ . Además se pudo determinar la constante del desdoblamiento-*l*,  $q_5$ , que permite estimar la frecuencia del origen de la banda del modo  $\nu_5$  en  $160 \pm 4 \text{ cm}^{-1}$  ( $\sim 62.5 \text{ }\mu\text{m}$ ) mediante la expresión  $\nu_0 = 2.12 B_0^2 / q_5$ . A nivel de laboratorio, el modo de *flexión* de baja energía  $\nu_5$  ha sido observado en experimentos de matrices a  $\sim 58 \text{ }\mu\text{m}$  (Withey *et al.* 1991). La similitud con la longitud de onda de la *banda infrarroja sin identificar* es muy atractiva.

En los experimentos de Withey *et al.* se observaron dos bandas a 170 y  $172.4 \text{ cm}^{-1}$  ( $58.8$  y  $58.0 \text{ }\mu\text{m}$ ) que se interpretaron como dos localizaciones diferentes de atrapamiento de C<sub>4</sub> en la matriz de Ar. Los dos valores podrían corresponder a la frecuencia del modo  $\nu_5$  de C<sub>4</sub> pero los autores adoptaron el valor de  $172.4 \text{ cm}^{-1}$ . Este valor está de acuerdo con la serie de picos observados mediante espectroscopia de fotoelectrones por Arnold *et al.* 1991. La diferencia entre el origen de la banda observada en los experimentos de matriz y la banda observada con el LWS es solo de  $2.6 \text{ cm}^{-1}$  y puede ser consistente con los desplazamientos que induce la matriz de Argón ( $\sim 1.5 \%$ ). Por otro lado, los cálculos *ab initio* existentes en la literatura predicen una longitud de onda en el rango  $47\text{--}57 \text{ }\mu\text{m}$  ( $175\text{--}215 \text{ cm}^{-1}$ ) y una intensidad en el IR para la banda de  $46.2 \text{ km mol}^{-1}$  (Martin *et al.* 1991; Watts *et al.* 1992; Taylor & Martin 1996; Van Orden & Saykally 1998), lo que equivale a un coeficiente de Einstein  $A(\nu_5 = 1 - 0) \simeq 0.25 \text{ s}^{-1}$ . Debido a la complejidad de los niveles electrónicos de C<sub>4</sub> y a la limitada precisión de estos cálculos teóricos, el valor anterior de la intensidad del modo  $\nu_5$  tiene que ser considerado como una primera aproximación ya que los cálculos *ab initio* de C<sub>4</sub> emplean la aproximación armónica para el tratamiento de la vibración. Sin embargo, para especies con movimientos amplios de flexión como las cadenas lineales carbonadas, y particularmente para radicales poliatómicos con niveles electrónicos de baja energía (caso del C<sub>4</sub>), la anarmonicidad puede ser relevante y la aproximación armónica proporciona una cota mínima a la intensidad de la transición.

El hecho de que la nueva banda observada (FIG. 8.3) contenga diversas estructuras espectrales sugiere que se trata de una transición con multiplicidad de spin mayor que 1. En particular puede tratarse de una transición vibracional  $^2\Sigma^-2\Pi$  o  $^3\Sigma-^3\Pi$ , justo el tipo de bandas que se esperaría para  $C_4H$  y  $C_4$ , que poseen niveles electrónicos fundamentales  $^2\Sigma^+$  y  $^3\Sigma_g^-$  respectivamente. Consecuentemente, los modos de *flexión* de más baja energía,  $\nu_7$  para  $C_4H$  y  $\nu_5$  para  $C_4$  tendrán respectivamente simetría vibrónica  $^2\Pi$  y  $^3\Pi$ .

Se puede argumentar en contra de  $C_4H$  como responsable de la banda en el IR-lejano teniendo en cuenta que aunque se han detectado varias líneas rotacionales puras del modo de *flexión*  $\nu_7$ , estas líneas no se detectan en el resto de objetos (salvo quizás en el *survey* espectral de CRL 618, véase la SEC. 7.6.3). En particular la no detección en Sgr B2 de líneas rotacionales puras de  $C_4H$  con  $n$ -bajo sugiere que la abundancia de esta especie es particularmente baja en Sgr B2 (Guélin, Mezaoui, & Friberg 1982). Parece pues tentador asignar la banda observada a  $\sim 57.5 \mu m$  en objetos post-AGB y en Sgr B2 al modo de *flexión*  $\nu_5$  de  $C_4$ . La asignación definitiva requiere mayor resolución espectral en la observación astronómica y mejor información sobre las constantes espectroscópicas a nivel teórico o de laboratorio.

#### $C_4$ : EL MEJOR CANDIDATO

Aparentemente, el mejor candidato para la banda observada es el carbono tetraatómico en su estado electrónico fundamental  $^3\Sigma_g^-$ . Debido a su spin electrónico no nulo cada nivel rotacional (caracterizados por el momento angular rotacional  $N$ ) se divide en tres niveles de estructura fina caracterizado por el momento angular total  $J=N+1, N, N-1$  (excepto cuando  $N=0$  donde sólo existe  $J=1$ ). El modo de *flexión* de baja energía en su transición  $\nu_5 = 1^1 - 0$  es una vibración doblemente degenerada en la que el nivel superior tiene simetría vibrónica  $^3\Pi$ . El mayor problema para asignar la banda observada a esta transición es el elevado valor que debería tener la constante de la interacción spin-órbita ( $A_{SO}$ ) del nivel vibracional  $^3\Pi$  para reproducir las observaciones. Puesto que el nivel electrónico fundamental del  $C_4$  es  $\Lambda = 0$ , uno esperaría una interacción spin-órbita ( $\propto A_{SO} \mathbf{S} \cdot \mathbf{\Lambda}$ ) mínima, y por tanto una constante  $A_{SO}$  pequeña. Sin embargo, si la molécula tiene un estado electrónico de baja energía con  $\Lambda \neq 0$  próximo al estado electrónico fundamental, la interacción vibrónica entre el nivel electrónico excitado  $\Lambda \neq 0$  y el modo de *flexión* (perteneciente al nivel electrónico fundamental con  $\Lambda = 0$ ) será intensa. Esta interacción provoca una mezcla de las funciones de onda de los dos estados, haciendo que la constante de spin-órbita  $A_{SO}$  en el modo de *flexión* sea considerable.

Este es el caso de  $C_2H$ , que tiene un nivel electrónico fundamental  $X^2\Sigma$  y un estado electrónico excitado  $A^2\Pi$  a  $\sim 5200$  K ( $3600 \text{ cm}^{-1}$ ). En estas condiciones el modo de *flexión*  $\nu_2$  en el estado electrónico fundamental tiene una constante no nula  $A_{SO} \simeq 0.3 \text{ cm}^{-1}$  (Jacox 1975). Para  $C_4H$ ,  $A_{SO}$  es particularmente elevada,  $\simeq 3 \text{ cm}^{-1}$  (Yamamoto *et al.* 1987) porque el estado electrónico  $A^2\Pi$  está sólo  $\sim 670$  K ( $468 \text{ cm}^{-1}$ ) por encima del fundamental  $X^2\Sigma$ . Para  $C_4$  la situación puede ser similar a la de  $C_4H$  ya que su primer nivel electrónico excitado  $^1\Delta$  está  $\sim 3800$  K ( $2680 \text{ cm}^{-1}$ ) por encima del fundamental  $^3\Sigma$  (Arnold *et al.* 1991; Xu *et al.* 1997).

El panel inferior de la FIG. 8.3 muestra el perfil sintético resultante en ETL para el modo  $\nu_5$  de  $C_4$  adoptando un valor de  $A_{SO} = 4 \text{ cm}^{-1}$  a diferentes temperaturas. La similitud con las observaciones es muy satisfactoria. Sin embargo, hay que notar que la constante  $A_{SO}$  utilizada es particularmente grande. Los diferentes modelos realizados muestran que las observaciones sólo puede reproducirse medianamente bien para valores de  $A_{SO} > 2 \text{ cm}^{-1}$ .

Existe otra posibilidad que puede explicar la complejidad de la banda y que permite valores más pequeños de  $A_{SO}$ . Para ello los isotopómeros  $^{13}\text{CCCC}$  y  $\text{C}^{13}\text{CCC}$  contribuirían notablemente a la emisión/absorción de la banda observada. Este fenómeno podría darse también en  $\text{C}_4\text{H}$ , si la banda corresponde a esta especie y no a  $\text{C}_4$ . En ese caso, la gran densidad de columna asociada a  $\text{C}_4\text{H}$  sería incompatible con la cotas superiores encontradas para la nube de Sgr B2 por Guélin *et al.* (1982). Si el responsable de la banda es definitivamente  $\text{C}_4$ , la densidad de columna también sería elevada. Considerando una temperatura de excitación vibracional entre 50 y 100 K para los objetos post-AGB, se ha encontrado un valor próximo a  $N(\text{C}_4) = 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ , es decir abundancias entre  $10^{-7}$  y  $10^{-6}$ . Asumiendo una temperatura de excitación menor para Sgr B2 (menor a la temperatura del polvo para que la banda se observe en absorción) se encuentra  $N(\text{C}_4) = 1.2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ , valor muy similar al encontrado en la SEC. 4.6 para  $\text{C}_3$ . La incertidumbre en el cálculo de la intensidad de la banda domina el error de estas densidades de columna. Teniendo en cuenta los efectos anarmónicos, la intensidad puede ser mayor y las densidades de columna encontradas deberán considerarse como un límite superior.

Los futuros telescopios espaciales equipados con instrumentos heterodinos, proporcionarán resoluciones espectrales muy superiores a las alcanzadas con ISO/LWS y permitirán la detección de nuevos cumulenos  $\text{C}_n$  a través de sus movimientos de vibración de baja energía en el IR-lejano. La detección de estas especies y la determinación de sus abundancias aclararán su papel en la formación de los responsables de las UIBs. Antes del lanzamiento de *Herschel*, se necesita realizar un importante trabajo de espectroscopia en el laboratorio y de cálculos *ab initio* para caracterizar completamente estas atractivas especies moleculares.

## 8.4 RESUMEN

En este capítulo se ha profundizado en la primera detección del carbono triatómico en el ISM (CAP. 4) presentando a **las cadenas lineales puras de carbono ( $\text{C}_n$ ) como posibles responsables de varias bandas sin identificar en el IR-lejano**. Esta clase de moléculas pueden ser los *ladrillos fundamentales* a partir de los cuales se formen macromoléculas ricas en carbono responsables de las UIBs (a través de su desexcitación vibracional) y de las DIBs (también a través del propio espectro electrónico de las  $\text{C}_n$ ). Se ha visto que la baja energía de sus modos vibracionales de *flexión* permite su detección en el IR-lejano, lo cual abre **nuevas posibilidades para detectar moléculas sin dipolo eléctrico permanente** (sin espectro rotacional). Los resultados más importantes del capítulo son:

- **Detección de las líneas rovibracionales R(2) y R(4) del modo de flexión  $\nu_2$  de  $\text{C}_3$  en la CSE de IRC+10216 con el LWS/FP.** Mediante un modelo LVG de la transición  $\nu_2 = 1-0$  se ha estimado una abundancia de  $\text{C}_3$  de  $\sim 10^{-6}$ .
- **Detección de una banda infrarroja sin identificar a  $57.5 \mu\text{m}$  en IRC+10216, CRL 2688, CRL 618, NGC 7027 y Sgr B2.** El análisis de la estructura y posición de la banda ha permitido asignarla de forma tentativa al **modo de flexión  $\nu_5$  de  $\text{C}_4$** . Los experimentos de matrices de Ar predicen una longitud de onda entre  $58.8$  y  $58.0 \mu\text{m}$  para el origen de esta banda. De confirmarse esta asignación, la abundancia máxima derivada para  $\text{C}_4$  sería similar a la de  $\text{C}_3$ . Además, se ha discutido la posibilidad de que  $\text{C}_4\text{H}$  sea la responsable de la banda a través de su poco conocido modo de *flexión*  $\nu_7$  ( $44-76 \mu\text{m}$ ).

## Capítulo 9

# Resumen, conclusiones y perspectivas

### RESUMEN

En esta tesis se ha presentado y analizado el espectro en el IR-lejano de alguna de las fuentes más significativas de la galaxia para el estudio del ISM y CSM (Sgr B2, CRL 2688, CRL 618 y NGC 7027). Además, en los tres últimos objetos se han realizado observaciones milimétricas y submilimétricas que aportan información complementaria a las líneas de investigación abiertas por las novedosas observaciones procedentes de ISO.

### PARTE I: NUBES INTERESTELARES: Sgr B2

En la primera parte del trabajo se ha analizado el espectro de la nube molecular Sgr B2. Esta extensa región está situada a unos 100 pc del centro dinámico de la galaxia y constituye un excelente *laboratorio* para el estudio del contenido molecular y condiciones físicas del gas en el núcleo de una galaxia.

El CG representa un  $\sim 0.1\%$  del volumen de la galaxia y sin embargo contribuye con un  $\sim 10\%$  del contenido molecular total. Sgr B2 es la nube más masiva del CG ( $\sim 10^7 M_{\odot}$ ) y uno de los mayores brotes de formación de estrellas masivas. El centro de la nube está dominado por tres condensaciones de gas y polvo, Sgr B2(N,M,S), en cuyo interior existen todos los trazadores de formación estelar: regiones HII ultracompactas, emisión en rayos-X, núcleos calientes y densos de material que rodea a las proto-estrellas, y emisión maser de varias especies moleculares.

Todo este medio, altamente fragmentado y de diferentes características cinemáticas y fisicoquímicas, se encuentra envuelto en una nube molecular gigante ( $\sim 15'$ ) menos densa ( $n_{H_2} \sim 10^4 \text{ cm}^{-3}$ ) y con temperaturas cinéticas considerables  $\geq 100 \text{ K}$ . Las condiciones físicas a gran escala, fuentes de energía, contenido molecular y abundancias en la *envoltura* son mucho menos conocidas. En particular, los mecanismos de calentamiento del gas neutro que explican las condiciones físicas inferidas siguen sin estar completamente establecidos. La similitud entre las propiedades más importantes de la *envoltura* de Sgr B2 (diferencias entre la temperatura del gas y polvo, turbulencia, emisión extensa de moléculas relacionadas con la presencia de choques de baja velocidad) con las del resto de nubes del CG, hace que se busque un paralelismo entre los mecanismos responsables de las propiedades promedio del ISM en el CG con aquellos que dominan en Sgr B2.

En este trabajo se han presentado *diversas técnicas* basadas en el análisis del espectro IR-lejano que permiten profundizar más en la *determinación de las condiciones físicas, fuentes de energía, contenido molecular y abundancias en la envoltura de Sgr B2*.

⊗ Primeramente se ha realizado un estudio detallado del espectro de Sgr B2(M) con la máxima resolución posible del instrumento LWS/Fabry-Perot ( $\sim 35 \text{ km s}^{-1}$ ). Este *survey* espectral entre 43 y  $197 \mu\text{m}$ , constituye una herramienta única para el estudio de Sgr B2 y ha abierto el campo de la Astrofísica Molecular en una ventana espectral casi inexplorada. Ha ofrecido la posibilidad de detectar nuevas moléculas y ha permitido el uso de nuevos trazadores de las condiciones del ISM. La mayoría de las líneas moleculares analizadas en este trabajo constituyen la *primera detección de la línea en el espacio*. Además, se ha podido realizar la *primera detección de NH en una nube molecular densa*, la *primera detección de  $\text{C}_3$  y orto- $\text{NH}_2$  en el ISM*, y posiblemente la *primera detección de  $\text{C}_4$  en el espacio*.

En total, se han identificado más de 70 líneas procedentes de 15 especies moleculares y atómicas. La mayoría de estas líneas aparecen en absorción, lo que indica que el gas trazado por las observaciones en el IR-lejano de Sgr B2 está situado *delante* de las fuentes de continuo.

La interpretación de las observaciones de estas líneas moleculares hacia Sgr B2 no es sencilla y se han utilizado modelos de transferencia radiativa no-locales que tratan de forma simultánea tanto las moléculas como el polvo. *La emisión procedente del continuo en el IR-lejano tiene un papel muy significativo en la excitación de los niveles* rotacionales de OH y  $\text{H}_2\text{O}$  y en los niveles rovibracionales de  $\text{C}_3$ . Debido a la elevada opacidad del continuo en Sgr B2(M), los granos de polvo de la *envoltura* también absorben la emisión molecular procedente del interior de la nube (sí algún fotón consigue escapar del interior). Consecuentemente, *las líneas observadas en absorción en el IR-lejano surgen de la envoltura externa de la nube* y no de las regiones de formación estelar en su interior. A pesar de las dimensiones del *haz* del instrumento LWS ( $\sim 80''$ ), los modelos para OH han resultado sensibles al tamaño ( $\sim 42''$ ) de la poco conocida *envoltura* de gas caliente alrededor de Sgr B2(M).

Las líneas rotacionales procedentes del nivel fundamental de OH,  $\text{H}_2\text{O}$  y  $\text{H}_3\text{O}^+$  además presentan absorción a velocidades LSR más negativas que aquellas asociadas físicamente a Sgr B2. Estas detecciones demuestran la presencia de estas especies en las nubes frías y poco densas situadas en la línea de mirada del CG.

⊗ Posteriormente se han analizado observaciones a gran escala  $9' \times 27'$  ( $25 \text{ pc} \times 70 \text{ pc}$ ) de la región de Sgr B2. Estas observaciones son de mediana resolución ( $\sim 1000 \text{ km s}^{-1}$ ) pero han permitido estudiar simultáneamente la temperatura y opacidad del polvo en la región, y confirmar que *las especies  $\text{H}_2\text{O}$ , OH y CH se distribuyen de forma extensa en las nubes moleculares*. Además, la presencia de líneas de estructura fina de  $\text{O}^{++}$ ,  $\text{N}^{++}$  y  $\text{N}^+$  ha desvelado la *presencia de una componente muy extensa de gas ionizado que alcanza posiciones muy alejadas ( $\sim 35 \text{ pc}$ ) al sur de las regiones de formación estelar en Sgr B2(M)*. La presencia de esta componente demuestra que el campo de radiación UV puede jugar un importante papel en la *envoltura extensa* de Sgr B2. Los efectos de la radiación en las nubes del CG, y en Sgr B2 en particular, habían sido poco tenidos en cuenta en anteriores trabajos. Hasta ahora, los choques de baja velocidad de *tipo-C* parecían el mecanismo más eficiente en explicar las diferencias observadas entre la temperatura del polvo y la temperatura



del gas molecular caliente, así como las elevadas densidades de columna de especies que, como SiO o NH<sub>3</sub>, están directamente relacionadas con la formación en la superficie de los granos. ***La presencia de un campo de radiación UV que ilumina grandes regiones de Sgr B2, provoca la formación de PDRs en la frontera entre el gas ionizado y el gas molecular más protegido de la radiación.*** Las condiciones físicas en estas regiones han podido ser estimadas a través de su emisión en C<sup>+</sup> y O<sup>0</sup>. También se han estudiado los efectos del campo de radiación en relación con la química de las especies oxigenadas (H<sub>2</sub>O, OH y O<sup>0</sup>) y nitrogenadas (NH<sub>3</sub>, NH<sub>2</sub> y NH). Para este estudio se han empleado diversas técnicas: ajustes de la emisión del continuo mediante dos *cuerpos grises*, modelos de fotoionización *CLOUDY*, códigos de *transferencia de radiación no-locales*, y comparaciones con modelos teóricos de PDRs.

## PARTE II: NUBES CIRCUNESTELARES: PPNeS

La segunda parte del trabajo ha estado dedicada al análisis de los espectros de las CSEs ricas en carbono CRL 2688 (PPNe joven), CRL 618 (PPNe) y NGC 7027 (PNe joven). Además, se ha profundizado en el estudio de los niveles vibracionales de baja energía (modos de *flexión*) de las cadenas lineales de carbono (C<sub>n</sub>).

La fase de PPNe representa una etapa muy corta ( $\sim 10^3$  años) en la evolución estelar pero por ella deben pasar las estrellas de masa intermedia ( $M_* < 8 M_\odot$ ) antes de convertirse en una PNe y terminar en forma de *enana blanca*. Las nuevas condiciones físicas en la evolución post-AGB: (i) interacción entre los nuevos vientos rápidos y el remanente de la envoltura AGB (generación de choques), y (ii) el incremento progresivo del campo de radiación UV procedente del objeto central ( $T_{ef} = 3000-30000$  K), sugieren que *las PPNeS sufren una evolución química*. El conocimiento que se tiene sobre la evolución química de las CSEs durante la fase de PPNe y las propiedades de los vientos post-AGB es limitado. Esto se debe a la corta duración de la fase de PPNe y a que la mayoría de los cambios se producen en el interior de la CSE, donde tanto la temperatura como la densidad del gas son elevadas. Estas condiciones provocan la excitación de niveles vibracionales moleculares (IR-medio y -cercano) y la población de niveles rotacionales de *J*-alto (IR-lejano), así como la aparición de líneas de estructura fina atómicas (IR-lejano).

En este trabajo se han analizado observaciones en el IR-lejano (*ISO*) complementadas con observaciones submilimétricas (*CSO*) y milimétricas (*IRAM-30m*) de las mismas fuentes, que han permitido ***determinar los cambios en el contenido molecular (respecto a la fase AGB) inducidos por las nuevas condiciones durante la evolución de las PPNeS.***

⊗ Primeramente se ha realizado un estudio comparativo de la emisión rotacional de CO (IR-lejano, submilimétricas y milimétricas) que ha permitido trazar la excitación del *viento de baja velocidad* remanente de la fase AGB y del *nuevo viento de alta velocidad* propio de la fase de PPNe en diferentes regiones de cada CSE. Con la información inferida de este análisis, se han realizado modelos de transferencia de radiación *LVG multi-moleculares* con los que se ha ajustado la emisión molecular en el IR-lejano procedente de cada fuente observada.

⊗ Complementariamente se ha realizado por primera vez un *survey* espectral completo de CRL 618 en las longitudes de onda  $\lambda = 3, 2$  y 1 mm. En este trabajo se han identificado cientos de líneas rotacionales pertenecientes a las moléculas polares abundantes (>30) en la CSE, lo que ha permitido compararlas con el contenido molecular presente en la fase AGB.

Anteriormente a las observaciones con *ISO* y a los *surveys* espectrales en milimétricas existía el convencimiento de que las envolturas AGB podían ser el lugar de **formación de moléculas orgánicas complejas** (como los PAHs) responsables de las UIBs y de las DIBs. Sin embargo, el contenido molecular observado en objetos AGB como IRC+10216 no satisface estas expectativas. El estudio presentado en este trabajo y el análisis realizado por nuestro grupo del espectro IR-medio de CRL 2688 y CRL 618 muestran que la situación cambia radicalmente **en la fase de PPNe con la aparición del campo de radiación UV y de los choques que se producen en la interacción de los vientos AGB y post-AGB.**

En particular, destaca la detección de polinos ( $C_nH_2$ ), cianopolinos ( $HC_{2n+1}N$ ), metilpolinos ( $CH_3-C_nH$ ), y sobre todo, la detección del benceno ( $C_6H_6$ ), la unidad aromática fundamental cuya presencia permite la formación de estructuras policíclicas mucho más complejas.

⊗ En el rango espectral del IR-lejano observado por *ISO* también tienen lugar los movimientos vibracionales de *flexión* de baja energía de algunas de las  $C_n$  más importantes. En la segunda parte del trabajo se ha presentado **la primera detección de  $C_4$  en el espacio (tentativa)** y se ha analizado **la detección del modo de flexión  $\nu_2$  de  $C_3$  en IRC+10216.** La presencia de los cumulenos  $C_n$  en el espacio, la determinación de su abundancia y la caracterización observacional o teórica de sus constantes moleculares puede ayudar a resolver algunos de los problemas astrofísicos más antiguos relacionados con la espectroscopia en el visible y en el IR. Su importancia se debe fundamentalmente al papel que pueden jugar en la química interestelar y circunestelar como especies intermedias en la formación de macromoléculas más complejas y como posibles candidatos para las DIBs y las UIBs.

## CONCLUSIONES

### PARTE I: NUBES INTERESTELARES: Sgr B2

⊗ **Sgr B2(M) es una intensísima fuente de continuo en el IR-lejano** (con  $L \simeq 2.4 \times 10^6 L_\odot$ ) cuyo máximo de emisión tiene lugar a  $\sim 80 \mu m$  (con una densidad de flujo de  $\sim 28000$  Jy). Los modelos de la emisión del polvo muestran que la opacidad del polvo es muy elevada ( $\tau_{100} \simeq 3.8 \pm 0.4$ ). Los mejores ajustes se obtienen para exponentes en la emisividad de los granos  $\beta \sim 1$  y temperaturas del polvo  $T_{polvo} = 31 \pm 1$  K. Los espectros de la emisión del continuo a gran escala muestran una región muy extensa de emisión de polvo ( $L_{LWS} \simeq 10^7 L_\odot$ ). Esta emisión ha sido ajustada con una componente de polvo a 13–22 K y otra componente más caliente a 24–39 K que contribuye en menos del 10% a la opacidad total del continuo.

⊗ **Primera detección del carbono  $C_3$  en el ISM.** Se han detectado varias líneas rovibracionales del modo de *flexión* de baja energía  $\nu_2$  a  $63.4 \text{ cm}^{-1}$  ( $\sim 158 \mu m$ ) hacia Sgr B2(M). Se ha estimado una abundancia de  $\chi(C_3) \simeq 3 \times 10^{-8}$  para Sgr B2, lo cual es consistente con la formación de  $C_3$  en las primeras etapas evolutivas de la nube molecular. En general, las moléculas poliatómicas tienen una contribución muy débil la emisión/absorción en el IR-lejano a través de su espectro rotacional. Sin embargo, se ha sugerido que pueden ser las portadoras dominantes a través de sus movimientos vibracionales de baja energía. La detección de  $C_3$  en uno de estos modos demuestra que el IR-lejano es una excelente ventana para la búsqueda de especies simétricas y sin espectro rotacional susceptible de ser observado desde radiotelescopios terrestres.

⊗ **Primera detección de  $\text{H}_3\text{O}^+$  en el IR-lejano.** Las líneas observadas provienen del estado fundamental del nivel de inversión  $\nu_2$  ( $0^+ \rightarrow 0^-$ ) a  $55.3 \text{ cm}^{-1}$  ( $\sim 181 \mu\text{m}$ ). Se han derivado abundancias similares tanto para Sgr B2(M) como para las nubes situadas en la línea de mirada de  $\chi(\text{H}_3\text{O}^+) \simeq 10^{-9}$ . Puesto que la recombinación disociativa de  $\text{H}_3\text{O}^+$  conduce a la formación eficiente de  $\text{H}_2\text{O}$  y OH, estas dos especies deben ser particularmente abundantes especialmente si contribuyen otros procesos químicos asociados la fotodisociación de moléculas relacionadas o a choques de baja velocidad. La contribución de  $\text{H}_3\text{O}^+$  a la línea  $2_{12}-1_{01}$  de  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  ( $\sim 181 \mu\text{m}$ ) utilizada como diagnóstico de la abundancia de del vapor de agua es del  $\sim 40\%$ . La contribución a la línea de  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  disminuye con la  $T_{\text{ex}}$  de las transiciones de rotación de  $\text{H}_3\text{O}^+$ .

⊗ **Detección de la absorción térmica del vapor de agua** hacia Sgr B2(M) y el primer cartografiado de la emisión maser a 183 GHz. La elevada opacidad de todas las transiciones ( $\sim 10^3$ ) en el IR-lejano hace que los modelos sean poco sensibles a las condiciones físicas de la región absorbente. En principio, tanto la envoltura ambiente de densidad moderada ( $T_k \sim 40 \text{ K}$ ;  $n(\text{H}_2) \simeq 10^5 \text{ cm}^{-3}$ ) como la envoltura más caliente y difusa ( $T_k \sim 100 \text{ K}$ ;  $n(\text{H}_2) < 10^4 \text{ cm}^{-3}$ ) pueden ser las responsables de la absorción de vapor de agua observada por ISO. Suponiendo que la absorción de  $\text{H}_3\text{O}^+$  y  $\text{H}_2\text{O}$  surgen en la misma región, se ha estimado un cociente de densidades de columna  $[\text{H}_2\text{O}]/[\text{H}_3\text{O}^+] \sim 200$ , inferior a las predicciones de los modelos de equilibrio químico. Por primera vez en el trabajo, se ha sugerido que la presencia de un campo de radiación UV en las regiones más externas de Sgr B2 podría provocar la fotodisociación del vapor de agua, disminuyendo su densidad de columna esperada (en función de la encontrada para  $\text{H}_3\text{O}^+$ ) y aumentando la de OH, producto resultante de la fotodisociación del vapor de agua.

⊗ **Detección del mecanismo de fluorescencia que permite bombear los niveles OH en el IR-lejano.** Se ha observado que las líneas rotacionales de OH de la escalera  $^2\Pi_{1/2}$  a  $\sim 98$  y  $\sim 163 \mu\text{m}$  aparecen en emisión, mientras que las *cross ladder* a  $\sim 79$ ,  $\sim 53$  y  $\sim 34 \mu\text{m}$ , y las líneas de la escalera  $^2\Pi_{3/2}$  a  $\sim 119$  y  $\sim 84 \mu\text{m}$  aparecen en absorción. El análisis de estas líneas ha permitido encontrar que la absorción/emisión de OH procede de una envoltura caliente y de densidad moderada ( $T_k \simeq 300 \text{ K}$ ;  $n_{\text{H}_2} \leq 10^4 \text{ cm}^{-2}$ ) no resuelta por el haz de  $80''$  del LWS. La representación más adecuada de la estructura física de la frontera externa de Sgr B2 es un *gradiente de temperaturas*, desde  $T_k = 40 \text{ K}$  en las regiones más internas de la envoltura, hasta  $T_k = 600 \text{ K}$  en las capas más externas y difusas. También se ha detectado el doblete fundamental de  $^{18}\text{OH}$  a  $\sim 120 \mu\text{m}$  lo que ha permitido obtener un cociente isotópico  $[^{16}\text{OH}]/[^{18}\text{OH}] \simeq 240-280$  en Sgr B2, y  $\simeq 500$  en la componente a  $V_{\text{LSR}} \simeq 0 \text{ km s}^{-1}$ . Estos cocientes son consistentes con el avanzado estado evolutivo del CG. La elevada abundancia de OH encontrada,  $(2-5) \times 10^{-6}$ , y el cociente  $[\text{OH}]/[\text{H}_2\text{O}] \sim 1-0.1$  derivado de las observaciones en el IR-lejano pueden ser consecuencia de la presencia de un campo de radiación UV que ilumina las capas externas de la nube, fotodisocia  $\text{H}_2\text{O}$  y forma PDRs en la envoltura de Sgr B2(M).

⊗ **La presencia de un campo de radiación UV en toda la región ha sido confirmada por la detección de una componente muy extensa de gas ionizado.** A partir del análisis del cociente de intensidades [OIII] 52/88 se ha estimado que la densidad electrónica promedio del gas ionizado es  $\sim 240 \text{ cm}^{-3}$ . De los cocientes [NIII]57/[NII]122 y los modelos de fotoionización se concluye que la radiación ionizante puede caracterizarse por una temperatura  $T_{\text{ef}} \simeq 36000 \text{ K}$  (típica de una estrella O7) y un parámetro de ionización bajo. El número de

fotones Lyman necesarios para explicar la componente de gas ionizado ha resultado equivalente al disponible en las regiones HII de Sgr B2(M,N,S), de lo que se concluye que *la ionización de todo el complejo Sgr B está dominada por Sgr B2*. También se ha visto que *las regiones al Sur de Sgr B2 pueden estar influidas por otras fuentes ionizantes cercanas a Sgr B1*. La localización y geometría de las fuentes ionizantes respecto a la nube extensa debe permitir la ionización de las regiones al Sur y al Este de Sgr B2(M). Sin embargo, dada la insuficiente resolución espectral y espacial de las observaciones de las líneas de estructura fina, no se ha podido realizar un estudio detallado de la geometría de la región. *Un medio inhomogéneo y rico en condensaciones alrededor de las fuentes ionizantes favorece también que la radiación escape y alcance grandes distancias en la envoltura de Sgr B2*. Por lo tanto, se ha confirmado que las PDRs pueden ser abundantes en la frontera entre el gas ionizado y el neutro. La comparación entre las intensidades de las líneas de estructura fina [CII]158  $\mu\text{m}$ , y [OI]63 y 145  $\mu\text{m}$  con modelos de PDR indican un aumento  $G_0 \simeq 10^{3-4}$  del campo de radiación en el UV-lejano y una densidad de  $10^{3-4} \text{ cm}^{-3}$  en las PDRs de Sgr B2. El calentamiento por efecto fotoeléctrico es consistente con la diferencia observada en Sgr B2 entre la temperatura del gas caliente y la del polvo ( $T_k > T_{\text{polvo}}$ ).

⊗ Las líneas de  $\text{H}_2\text{O}$ , OH y CH procedentes del nivel rotacional fundamental producen absorción en todas las posiciones observadas de la región. Esto es una evidencia de que *estas especies se distribuyen de forma extensa en las nubes moleculares*. Los modelos de transferencia de radiación de OH muestran que el gas neutro extenso en las capas moleculares externas de la nube tiene una densidad  $n_{\text{H}_2} = 10^{3-4} \text{ cm}^{-3}$  y están a una temperatura de  $T_k = 40-100 \text{ K}$ . Estas condiciones físicas son intermedias entre las del gas ionizado y las del gas molecular denso en las condensaciones del interior de la nube. Finalmente se ha concluido que en la envoltura de Sgr B2 *la química basada en especies oxigenadas ( $\text{H}_2\text{O}$ , OH,  $\text{O}^0$ ) parece dominada por procesos de fotodisociación*. De hecho, la correlación encontrada entre las líneas OH  $\sim 79 \mu\text{m}$  y [OI]145  $\mu\text{m}$  confirma que una fracción considerable el gas  $\text{O}^0$  caliente se forma a partir de la fotodisociación de OH y/o surge de las mismas regiones del gas OH caliente. Las primeras detecciones de NH y  $\text{NH}_2$  en el IR-lejano han permitido profundizar en la química basada en especies nitrogenadas. Se ha encontrado que *en Sgr B2(M), el cociente de abundancias  $\text{NH}_3/\text{NH}_2/\text{NH} \simeq 100/10/1$  puede ser explicado satisfactoriamente por los modelos de choques de baja velocidad*.

Además de los choques de baja velocidad, la extensa envoltura de Sgr B2 está sometida a procesos de fotoionización y fotodisociación. La coexistencia de mecanismos de calentamiento mecánicos y de mecanismos radiativos (basados en los efectos de un campo de radiación UV que baña un medio inhomogéneo) parece ser el escenario dominante en la envoltura de Sgr B2. La complejidad química observada es posiblemente el resultado de la combinación de estos dos escenarios.

## PARTE II: NUBES CIRCUNESTELARES: PPNeS

⊗ Los nuevos mecanismos que aparecen durante la fase de PPNe (*interacción entre vientos y aumento del campo de radiación UV* procedente del objeto central) tienen una importancia crucial para la química de la CSE. *La evolución los nuevos fenómenos propios de la fase de PPNe determinan la evolución del contenido molecular de las CSEs*.

La evidencia espectroscópica del aumento del flujo de fotones UV es la aparición de líneas de estructura fina atómicas en el espectro de CRL 618. Por otro lado, los perfiles de las líneas de CO observadas muestran que la velocidad de los vientos moleculares va decreciendo paulatinamente. Esto sugiere que el efecto que tienen los choques sobre el remanente de CSE AGB disminuye con el grado de evolución de la PPNe. Respecto a las líneas rotacionales de CO en CRL 2688 y CRL 618, se ha observado que por encima de una transición rotacional  $J_{min}$ , la emisión del *viento lento*, remanente de la fase AGB, es menos intensa que la del *viento rápido* que surge del interior de la CSE durante la fase de PPNe. ***Las líneas de CO con  $J$ -alto observadas en el IR-lejano son imprescindibles para poder determinar las condiciones físicas en el interior de la CSE donde se están produciendo los cambios más importantes de la fase de PPNe.***

⊗ En CRL 2688 el campo de radiación UV no es suficientemente intenso para producir una fotodisociación considerable del interior de la CSE. La detección de un *viento rápido* que surge del interior de la CSE sugiere que estas regiones son calentadas por los choques producidos en la interacción con el remanente AGB. El enfriado de la CSE está dominado por la emisión rotacional de CO y HCN en el IR-lejano. Estas especies también son dominantes en la fase AGB (representada por IRC+10216). Sin embargo, la emisión de HCN en niveles vibracionales excitados desaparece en CRL 2688. Es decir, ***ya en las primeras etapas de la evolución post-AGB, el remanente de envoltura AGB empieza a alejarse del objeto central.*** La presencia de polinos como  $C_4H_2$  y  $C_6H_2$  confirma que ***en CRL 2688 ha comenzado una importante evolución química en comparación con IRC+10216.*** El origen de la nueva química son los choques y el aumento del campo de radiación UV.

⊗ En CRL 618 la velocidad de los *vientos rápidos* es superior a los de CRL 2688. Sin embargo, el cambio más significativo es el intenso campo de radiación UV que comienza a reprocesar el contenido molecular de la CSE. La química está ahora dominada por la fotólisis de algunas especies moleculares clave para el esquema químico de la CSE y por reacciones *ion-neutro*. Esta evolución química conduce a la ***formación de especies oxigenadas como OH y  $H_2O$***  (no esperadas en una PPNe con  $C/O > 1$ ), a la ***variación de las abundancias moleculares*** ( $\chi(HCN) \simeq \chi(HNC)$  en PPNe, mientras que  $\chi(HCN) \gg \chi(HNC)$  en AGBs), y a la ***formación de moléculas orgánicas más complejas*** (como los polinos o el benceno). El gas en la CSE se enfría fundamentalmente por las líneas de CO ( $J$ -alto) y por las líneas de estructura fina [CII] y [OI]. De las observaciones en el IR-lejano y del *survey* espectral en milimétricas se concluye que ***las PPNe son las "factorías" más importantes del espacio para la producción de moléculas orgánicas complejas.***

⊗ En NGC 7027 la temperatura del objeto central es tan elevada que el campo de radiación UV ha ionizado y fotodisociado una fracción considerable de la CSE. Como consecuencia, las abundancias moleculares se han modificado notablemente desde la fase de PPNe. Especies como  $H_2O$  o  $HNC$  ***han desaparecido casi en su totalidad***, mientras que ***otras moléculas como CH y  $CH^+$  se forman eficientemente.*** Los *vientos rápidos* han decelerado al alcanzar la fase de PNe. ***La radiación UV domina todos los procesos químicos en la CSE.*** El efecto refrigerador de las líneas rotacionales de CO es mucho menor, ***el enfriado de la envoltura está dominado por las líneas de estructura fina atómicas.***

⊗ Los cumulenos  $C_n$  pueden ser los *ladrillos fundamentales* a partir de los cuales se formen moléculas complejas responsables de las UIBs (a través de su desexcitación vibracional) y de las DIBs (también a través del propio espectro electrónico de las  $C_n$ ). ***La baja energía de sus modos de flexión permite su detección en el IR-lejano***, y abre nuevas posibilidades para ***detectar moléculas sin dipolo eléctrico permanente (sin espectro rotacional)***.

⊗ Se han detectado dos líneas rovibracionales R(2) y R(4) del modo de *flexión*  $\nu_2$  de  $C_3$  en IRC+10216. Mediante un modelo LVG de la transición  $\nu_2 = 1-0$  se ha estimado una abundancia de  $C_3$  de  $\sim 10^{-6}$ . Estos resultados sugieren que ***la abundancia de  $C_3$  es mucho mayor a la esperada por los modelos teóricos***. Esto puede ser consecuencia de la ausencia de reacciones de fotodisociación de especies poliatómicas carbonadas en los esquemas químicos.

⊗ Finalmente se ha detectado una *banda infrarroja sin identificar* a  $57.5 \mu\text{m}$  en IRC+10216, CRL 2688, CRL 618, NGC 7027 y Sgr B2. El análisis de la estructura, posición de la banda y los experimentos en matrices de Ar sugieren que se trata del modo de *flexión*  $\nu_5$  de  $C_4$ . De confirmarse, (***primera detección de  $C_4$  en el espacio***), la abundancia máxima derivada sería similar a la de  $C_3$ , lo que indicaría que las cadenas lineales  $C_n$  con un número mayor de átomos pueden detectarse también el IR-lejano. Aunque no se puede descartar completamente, existen ***más argumentos en contra de  $C_4H$  como la responsable de la banda*** a través del modo de *flexión*  $\nu_7$  ( $44-76 \mu\text{m}$ ).

## PERSPECTIVAS

El trabajo de *espectroscopia molecular* desarrollado en esta tesis puede considerarse como la *punta del iceberg* de lo que supondrá para el estudio de Sgr B2, CRL 2688, CRL 618 y NGC 7027, el futuro desarrollo de la Astrofísica Molecular en el IR-lejano y en submilimétricas. La comprensión profunda de los fenómenos más importantes que ocurren en el ISM y CSM sería imposible sin el alcance y la visión proporcionada por las observaciones en el IR-lejano. En este sentido, el trabajo aquí presentado corresponde al máximo aprovechamiento de las primeras observaciones de líneas moleculares en este rango proporcionadas por ISO. Sin embargo, la escala de los fenómenos físicos y cinemáticos involucrados en las nubes del ISM y CSM, y la cantidad de especies moleculares que podrían estar presentes, hace que la sensibilidad y resolución espectral/espacial de las observaciones en el IR-lejano tenga que ser mejorada.

El futuro más cercano pasa por el lanzamiento del *Herschel Space Observatory* (ESA) en el 2007 que contará con un telescopio de  $3.5 \text{ m}$  de diámetro e instrumentos que operarán entre  $\sim 60$  y  $\sim 650 \mu\text{m}$  y proporcionarán resoluciones en velocidad de hasta  $\sim 0.5 \text{ km s}^{-1}$ . A nivel de espectroscopia molecular, se podrán realizar *surveys* espectrales completos de muchas más fuentes que los realizados a la máxima resolución posible ( $\sim 35 \text{ km s}^{-1}$ ) del ISO/LWS-FP (prácticamente sólo Sgr B2 y Orión). Muchas de las líneas moleculares observadas con ISO se desdoblarán en diferentes componentes de estructura hiperfina e incluso en líneas de diferentes especies. Esto hará que las abundancias de muchas especies moleculares puedan determinarse con gran exactitud. Además, se podrán resolver individualmente las componentes rotacionales de las bandas vibracionales de los modos de *flexión* de especies poliatómicas. Esto contribuirá a determinar exactamente la forma de la banda y a que se puedan realizar modelos mucho más refinados de la emisión/absorción rovibracional.

Puesto que la región del espectro a  $\lambda \geq 200 \mu\text{m}$  permanece desconocida, en pocos años nos volveremos a encontrar con el reto de disponer de espectros a longitudes de onda inexploradas con anterioridad. Las posibilidades de detectar nuevas moléculas serán otra vez elevadas. De ahí que sea conveniente extender los catálogos de líneas moleculares al mayor número de especies moleculares candidatas. La experiencia adquirida en el análisis de los *surveys* espectrales de Sgr B2(M) en el IR-lejano y de CRL 618 en milimétricas y submilimétricas será determinante. La cantidad de líneas que podrán ser detectadas con *Herschel* hace necesaria la automatización y sistematización del proceso de identificación de líneas moleculares.

Finalmente, muchas de las líneas moleculares de interés podrán cartografiarse y proporcionarán una valiosa información sobre la geometría y la cinemática de las regiones estudiadas.

La mayor sensibilidad y resolución espacial de *Herschel* hará que estudios similares a los aquí presentados del ISM en el CG y de las envolturas circunestelares puedan realizarse en núcleos extragalácticos y en poblaciones de estrellas evolucionadas de otras galaxias. Estos futuros estudios podrán generalizar la complejidad química observada en multitud de entornos de nuestra galaxia a la *complejidad química del Universo* en su conjunto.

Gracias a las observaciones en el IR procedentes de **ISO**, la Astrofísica Molecular *ha cumplido la mayoría de edad* como parte de la Astronomía. Cada vez son más los campos abarcados por esta apasionante disciplina (galaxias a alto redshift, Sistema Solar, Astromineralogía, el origen de la vida etc.), y son más las interrelaciones con investigadores de Ciencias afines.

En el campo particular de la *espectroscopia molecular* es necesaria una relación fluida entre Astrónomos y Químicos teóricos y experimentales. La sofisticación en los cálculos cuánticos *ab initio* debe orientarse a la determinación de las frecuencias de las transiciones de las moléculas de interés Astrofísico, los momentos dipolares eléctricos de las transiciones activas y las secciones eficaces de colisión con otras especies. Muchos de estos parámetros pueden obtenerse experimentalmente si se consigue sintetizar en el laboratorio la especie deseada. Para ello, hay que equipar a los experimentales con los instrumentos adecuados (láseres fotodisociadores, espectrómetros que operen en la región del THz, equipos de confinamiento en matrices, etc.).

El salto cuantitativo que dará la *Radio Astronomía* de esta cooperación obtendrá sus frutos con la puesta en funcionamiento del *Atacama Large Millimeter Array* (ALMA) en el 2010. Esta instalación (Chajnator, Chile) utilizará no menos de 64 antenas de 12 metros de diámetro y operará en las ventanas atmosféricas entre  $\sim 10 \text{ mm}$  y  $\sim 350 \mu\text{m}$ . La resolución espectral en velocidades ( $\leq 0.05 \text{ km s}^{-1}$ ) y la resolución espacial ( $\sim 0.01''$ ) no tendrá precedente alguno en la Astronomía observacional. La formación de una generación de astrofísicos con dominio de la observación en todo el espectro electromagnético es esencial para hacer comprender a la sociedad el esfuerzo económico e intelectual que suponen estas grandes instalaciones terrestres y espaciales. Después de todo, el avance del *conocimiento humano* sobre nuestro lugar en el Universo es patrimonio de *todos*.

1

1

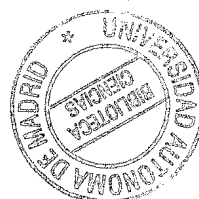


## Apéndice A

# Modelos de OH en Sgr B2

### A.1 MODELOS NO-LOCALES DE OH

En este apéndice se presentan algunos de los modelos realizados para interpretar las observaciones de OH en Sgr B2. Los más representativos se mostraron en la SEC. 4.5. Aquí se presenta una exploración más amplia del espacio de parámetros.



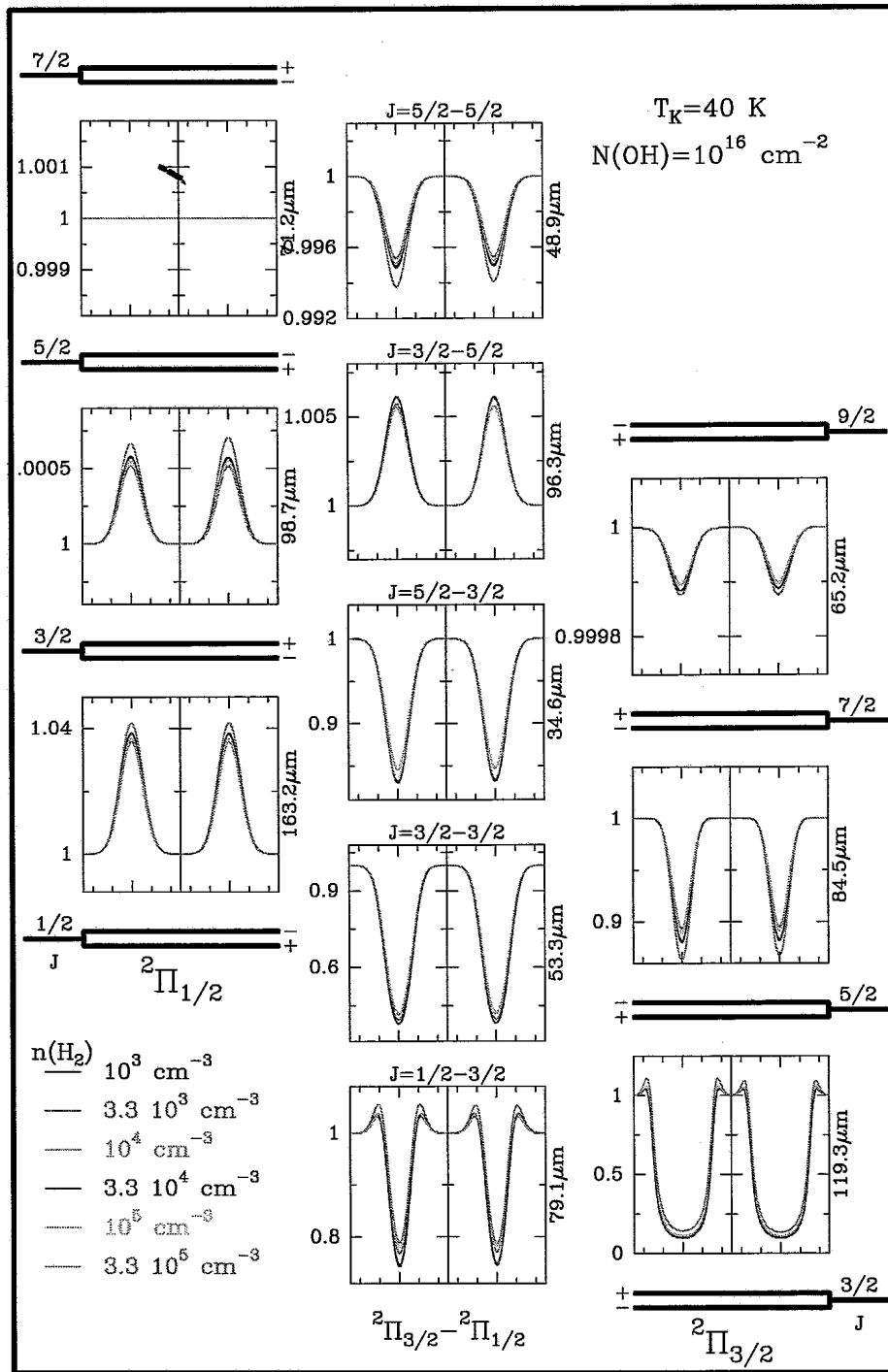


FIGURA A.1: Conjunto A.1 de modelos de OH para Sgr B2. Los paneles centrales corresponden a las transiciones cross ladder. Las intensidades de las líneas están normalizadas al flujo del continuo. Las longitudes de onda de cada transición se muestran en la parte derecha de cada panel. Todos los modelos tienen  $T_k = 40$  K y  $N(\text{OH}) = 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ . La densidad,  $n(\text{H}_2)$ , varía entre  $10^3 \text{ cm}^{-3}$  y  $3.3 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$ . La resolución de los perfiles de línea es de  $1 \text{ km s}^{-1}$ .

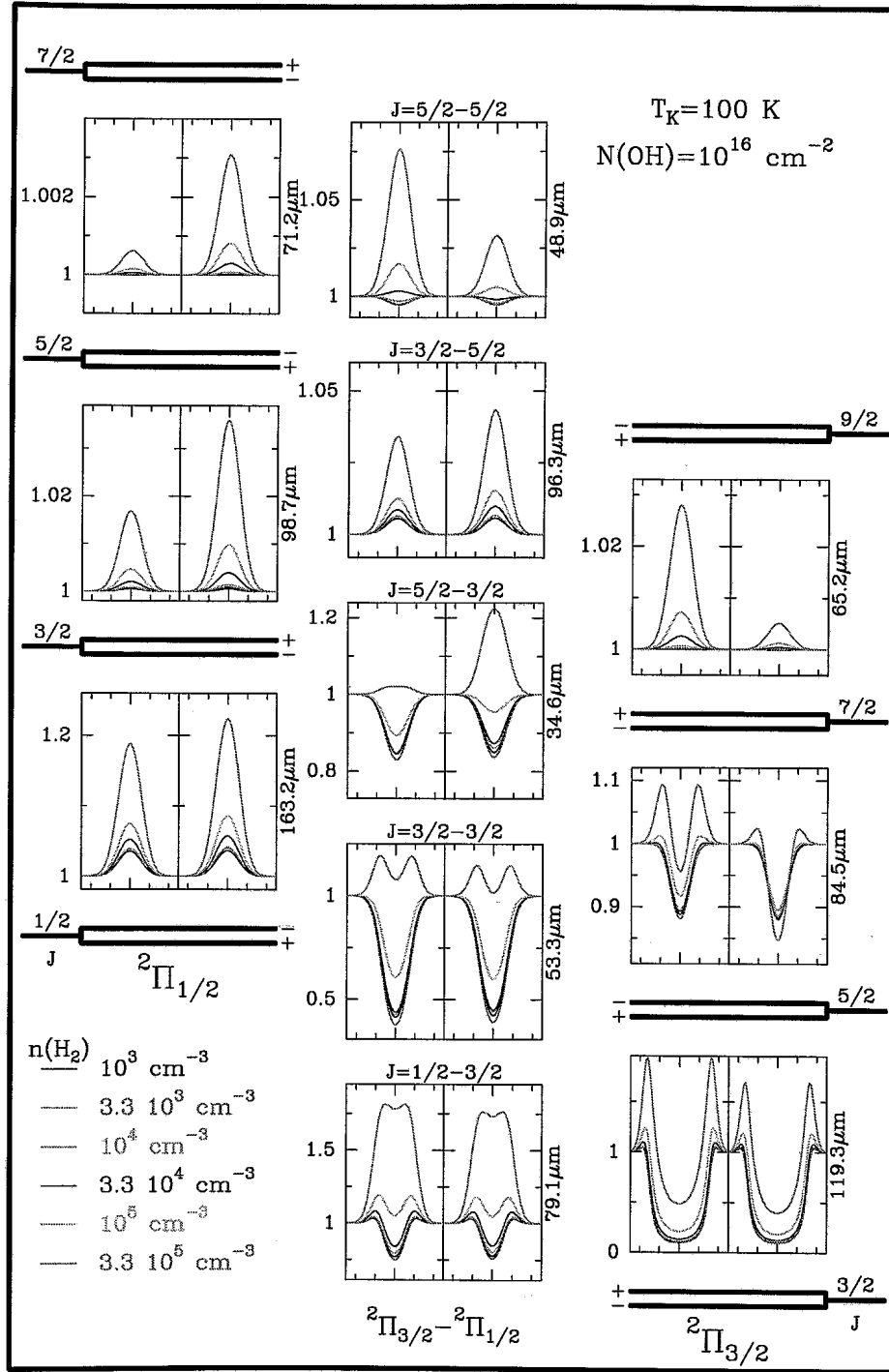


FIGURA A.2: Conjunto A.2 de modelos de OH para Sgr B2. Los paneles centrales corresponden a las transiciones cross ladder. Las intensidades de las líneas están normalizadas al flujo del continuo. Las longitudes de onda de cada transición se muestran en la parte derecha de cada panel. Todos los modelos tienen  $T_k = 100 \text{ K}$  y  $N(\text{OH}) = 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ . La densidad,  $n(\text{H}_2)$ , varía entre  $10^3 \text{ cm}^{-3}$  y  $3.3 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$ . La resolución de los perfiles de línea es de  $1 \text{ km s}^{-1}$ .

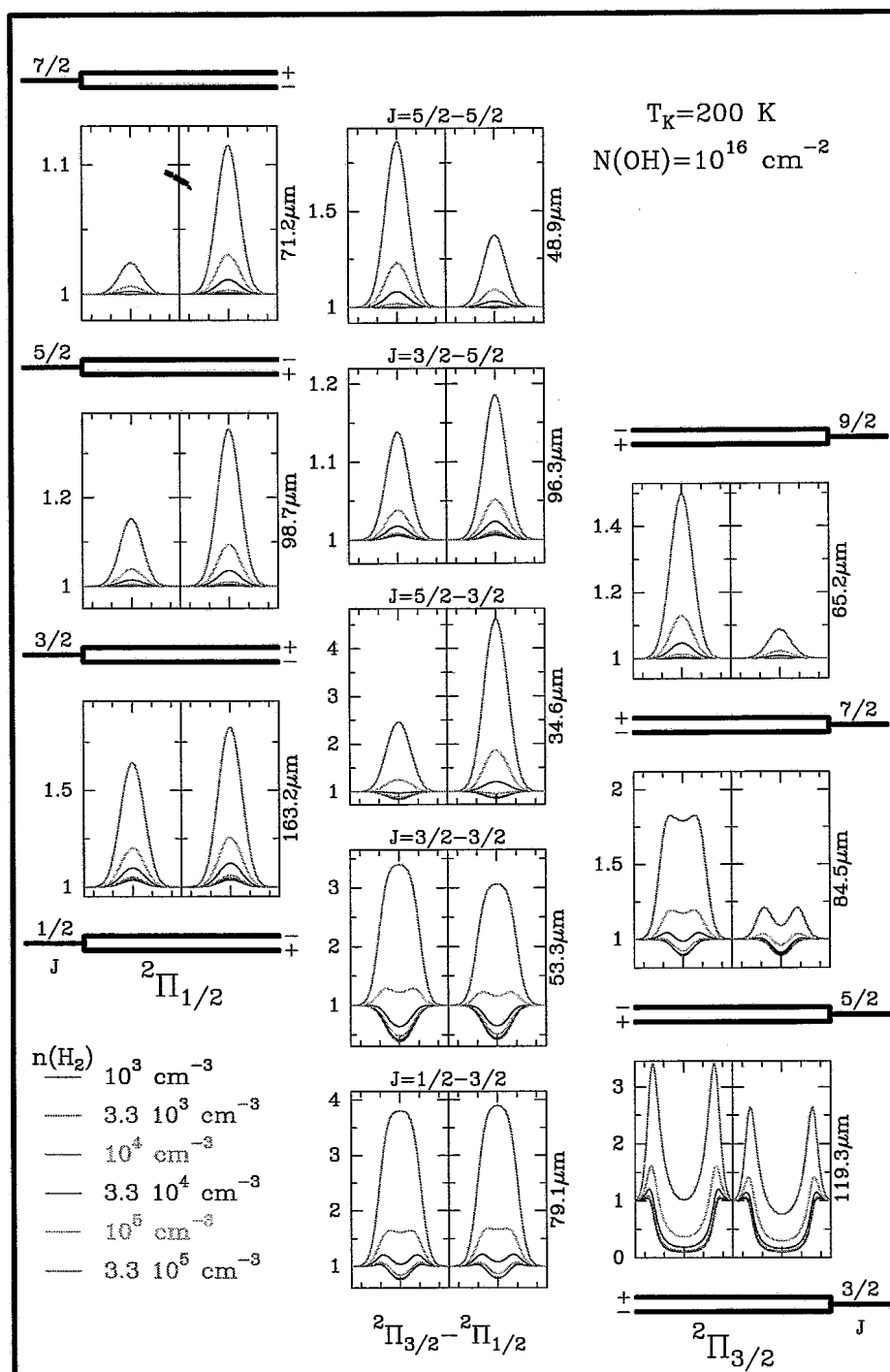


FIGURA A.3: Conjunto A.3 de modelos de OH para Sgr B2. Los paneles centrales corresponden a las transiciones cross ladder. Las intensidades de las líneas están normalizadas al flujo del continuo. Las longitudes de onda de cada transición se muestran en la parte derecha de cada panel. Todos los modelos tienen  $T_K=200 \text{ K}$  y  $N(\text{OH})=10^{16} \text{ cm}^{-2}$ . La densidad,  $n(\text{H}_2)$ , varía entre  $10^3 \text{ cm}^{-3}$  y  $3.3 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$ . La resolución de los perfiles de línea es de  $1 \text{ km s}^{-1}$ .

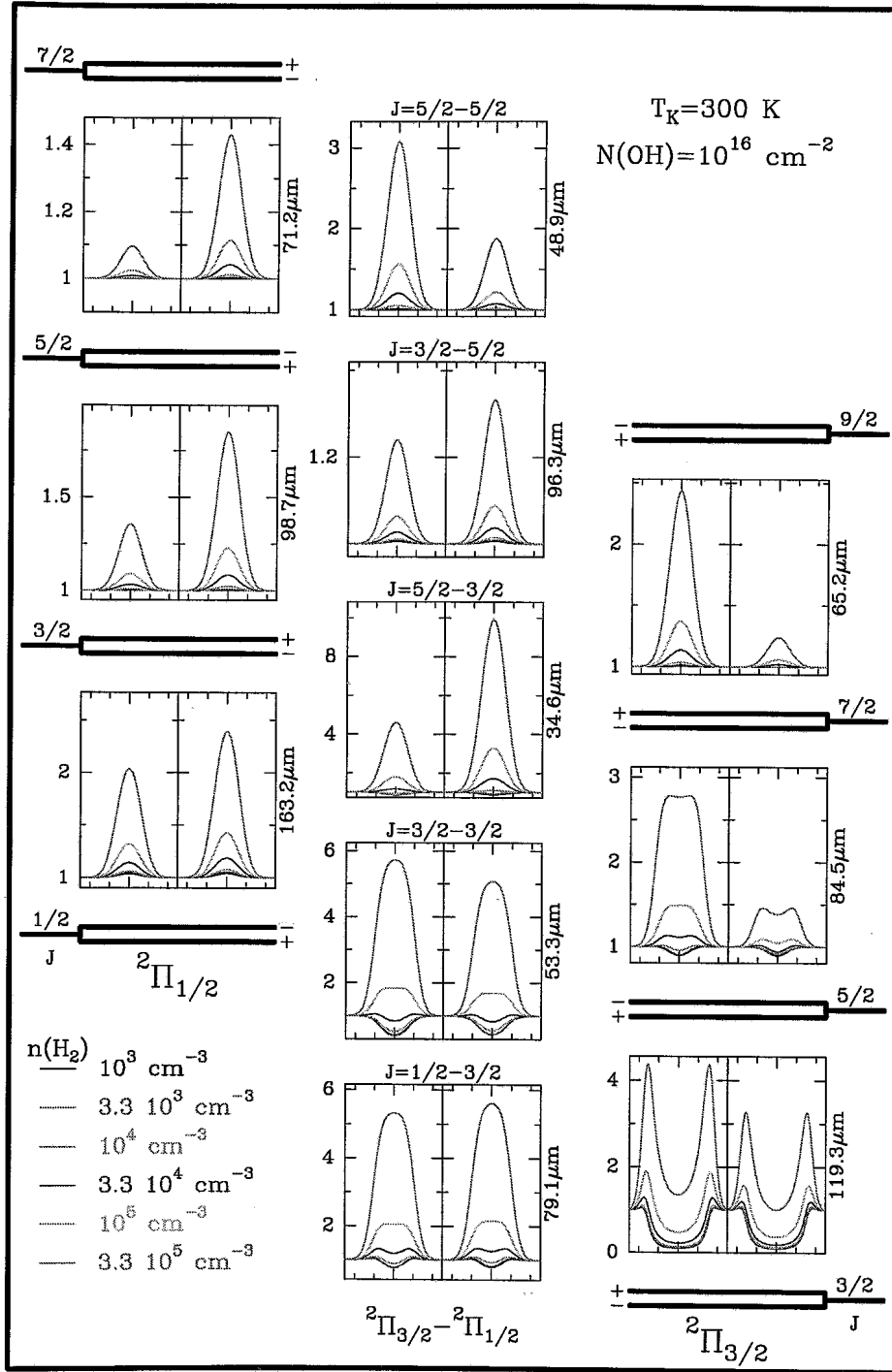


FIGURA A.4: Conjunto A.4 de modelos de OH para Sgr B2. Los paneles centrales corresponden a las transiciones cross ladder. Las intensidades de las líneas están normalizadas al flujo del continuo. Las longitudes de onda de cada transición se muestran en la parte derecha de cada panel. Todos los modelos tienen  $T_k=300 \text{ K}$  y  $N(\text{OH})=10^{16} \text{ cm}^{-2}$ . La densidad,  $n(\text{H}_2)$ , varía entre  $10^3 \text{ cm}^{-3}$  y  $3.3 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-3}$ . La resolución de los perfiles de línea es de  $1 \text{ km s}^{-1}$ .

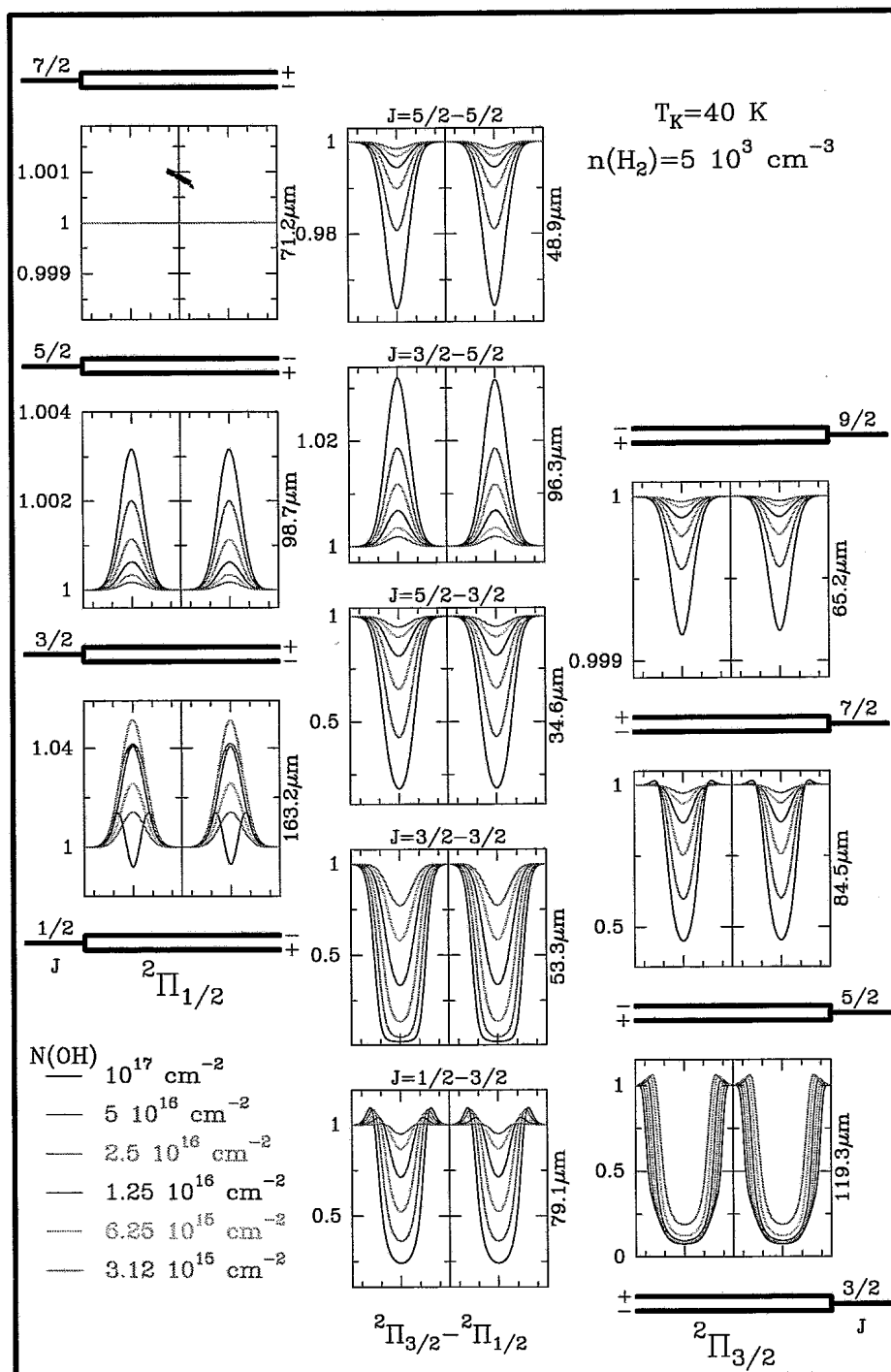


FIGURA A.5: Conjunto A.5 de modelos de OH para Sgr B2. Los paneles centrales corresponden a las transiciones cross ladder. Las intensidades de las líneas están normalizadas al flujo del continuo. Las longitudes de onda de cada transición se muestran en la parte derecha de cada panel. Todos los modelos tienen  $T_K=40 \text{ K}$  y  $n(\text{H}_2)=5 \times 10^3 \text{ cm}^{-3}$ .  $N(\text{OH})$  varía entre  $3.12 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  y  $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . La resolución de los perfiles de línea es de  $1 \text{ km s}^{-1}$ .

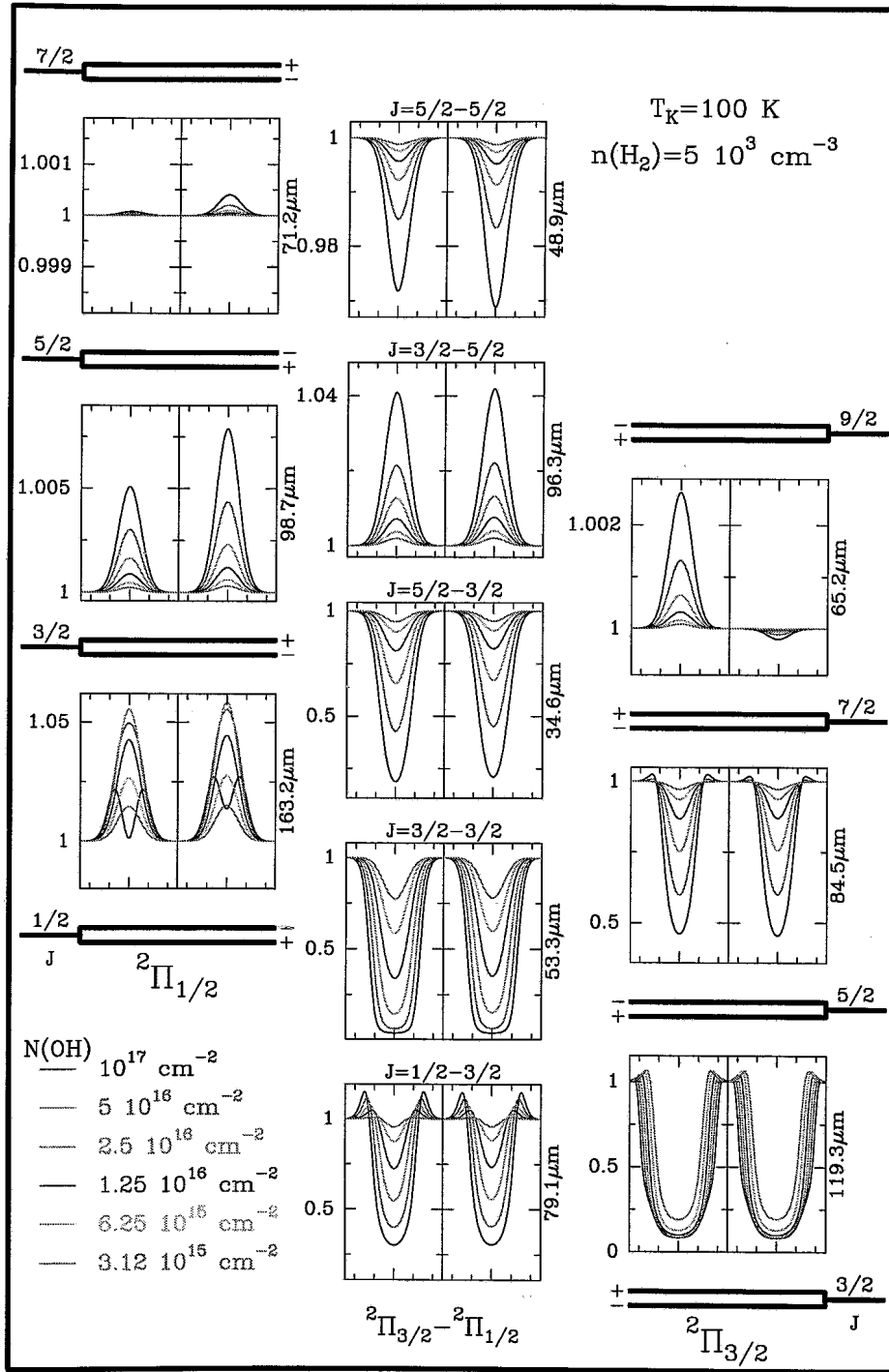


FIGURA A.6: Conjunto A.6 de modelos de OH para Sgr B2. Los paneles centrales corresponden a las transiciones cross ladder. Las intensidades de las líneas están normalizadas al flujo del continuo. Las longitudes de onda de cada transición se muestran en la parte derecha de cada panel. Todos los modelos tienen  $T_k=100\text{ K}$  y  $n(\text{H}_2)=5 \times 10^3 \text{ cm}^{-3}$ .  $N(\text{OH})$  varía entre  $3.12 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  y  $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . La resolución de los perfiles de línea es de  $1 \text{ km s}^{-1}$ .

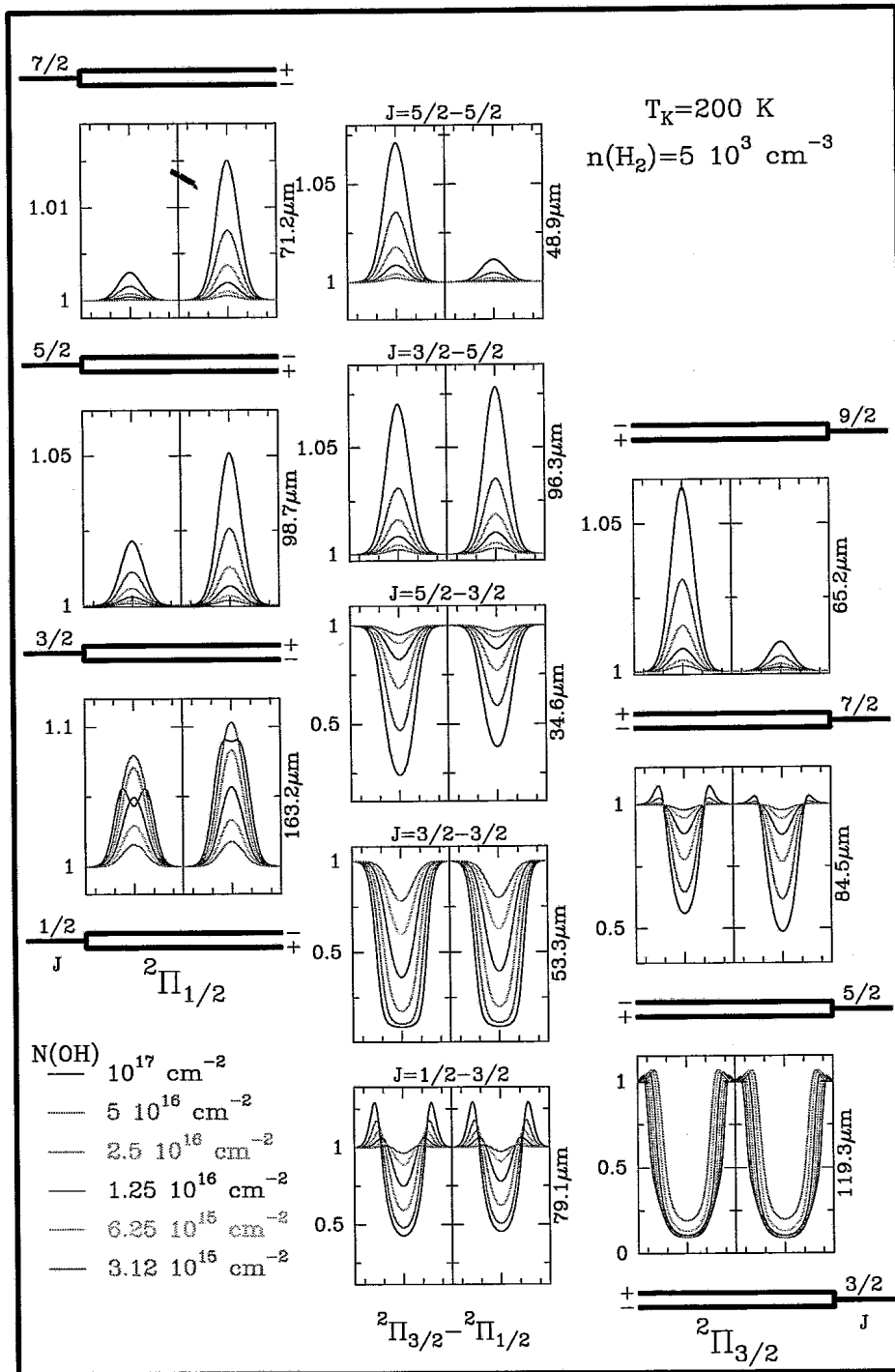


FIGURA A.7: Conjunto A.7 de modelos de OH para Sgr B2. Los paneles centrales corresponden a las transiciones cross ladder. Las intensidades de las líneas están normalizadas al flujo del continuo. Las longitudes de onda de cada transición se muestran en la parte derecha de cada panel. Todos los modelos tienen  $T_k = 200 \text{ K}$  y  $n(\text{H}_2) = 5 \times 10^3 \text{ cm}^{-3}$ .  $N(\text{OH})$  varía entre  $3.12 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  y  $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . La resolución de los perfiles de línea es de  $1 \text{ km s}^{-1}$ .



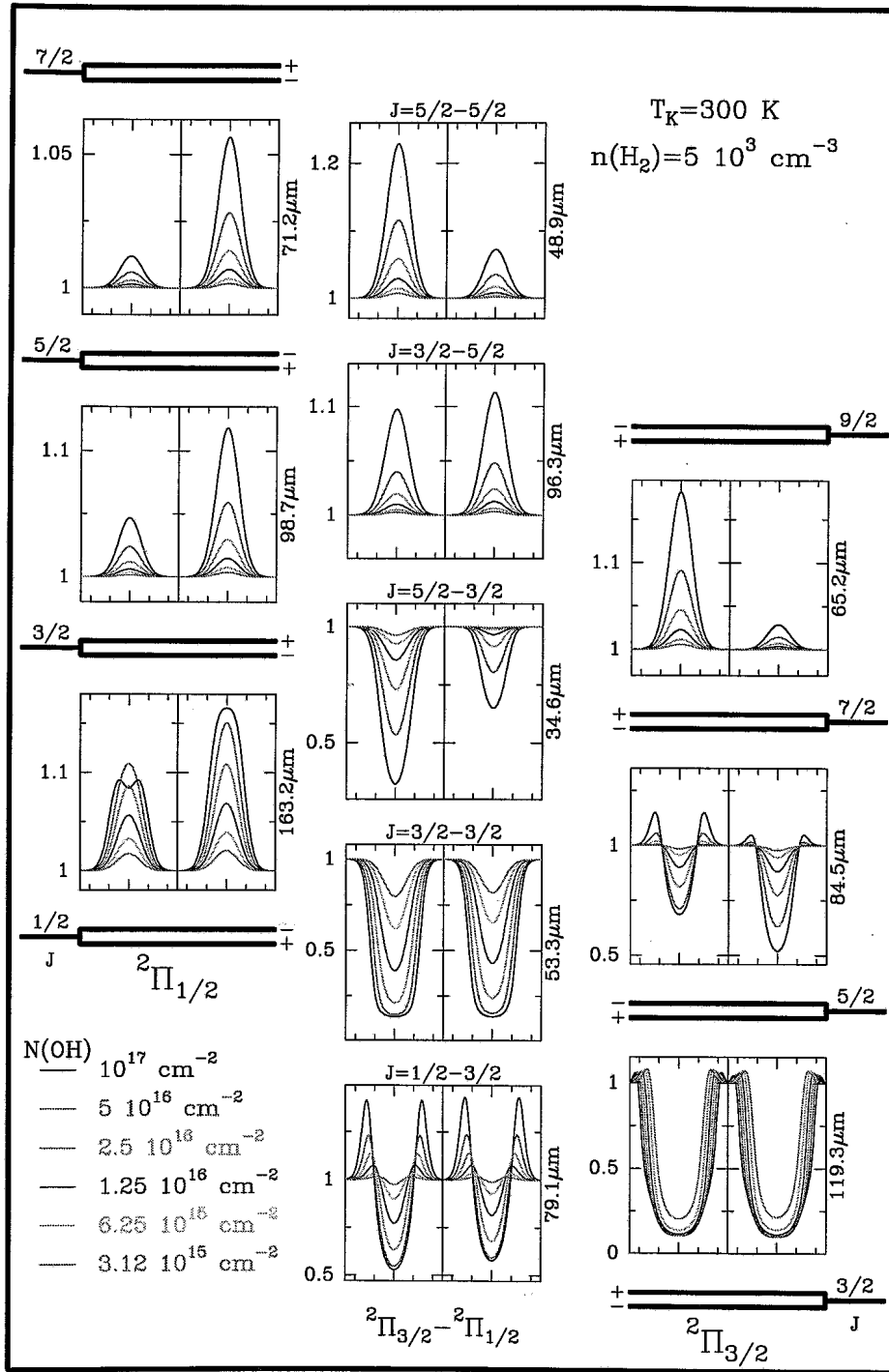


FIGURA A.8: Conjunto A.8 de modelos de OH para Sgr B2. Los paneles centrales corresponden a las transiciones cross ladder. Las intensidades de las líneas están normalizadas al flujo del continuo. Las longitudes de onda de cada transición se muestran en la parte derecha de cada panel. Todos los modelos tienen  $T_k = 300 \text{ K}$  y  $n(\text{H}_2) = 5 \times 10^3 \text{ cm}^{-3}$ .  $N(\text{OH})$  varía entre  $3.12 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  y  $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . La resolución de los perfiles de línea es de  $1 \text{ km s}^{-1}$ .

1

1

# Publicaciones

Lista de publicaciones relacionadas con el trabajo presentado:

## PUBLICACIONES EN REVISTAS INTERNACIONALES CON SISTEMA DE ARBITRAJE

1. "*Far-IR detection of  $C_3$  in Sagittarius B2 and IRC+10216*";  
J. Cernicharo, **J.R. Goicoechea**, E. Caux. 2000, *ApJ*, 534, L199
2. "*Far-IR detection of  $H_3O^+$  in Sagittarius B2*";  
**J.R. Goicoechea**, J. Cernicharo. 2001, *ApJ*, 554, L213
3. "*Far-IR OH fluorescent emission in Sagittarius B2*";  
**J.R. Goicoechea**, J. Cernicharo. 2002, *ApJ*, 576, L77
4. "*Chemical evolution of the circumstellar envelopes of carbon-rich post-AGB objects*";  
F. Herpin, **J.R. Goicoechea**, J. Cernicharo, J.R. Pardo. 2002, *ApJ*, 577, 961
5. "*A new infrared band in the interstellar and circumstellar clouds:  $C_4$  or  $C_4H$ ?*";  
J. Cernicharo, **J.R. Goicoechea**, Y. Benilan. 2002, *ApJ*, 580, L157
6. "*The far-IR spectrum of Sagittarius B2 region:  
Extended molecular absorption, photodissociation and photoionization*";  
**J.R. Goicoechea**, N.J. Rodríguez-Fernández, J. Cernicharo. 2003, *ApJ*, enviado
7. " *$HC_3N$  pure rotational lines in ground and vibrationally excited states toward CRL 618*";  
J.R. Pardo, J. Cernicharo, **J.R. Goicoechea**, T.G. Phillips, 2003, *A&A*, enviado
8. "*Warm (?) water vapor around Sagittarius B2*"; J. Cernicharo, **J.R. Goicoechea**, J.R. Pardo, A. Asensio Ramos, C. Ceccarelli. 2003, *ApJ*, en preparación
9. "*The millimeter spectrum of CRL 618 from 82 to 276 GHz*"; J. Cernicharo, J.R. Pardo, **J.R. Goicoechea**, M. Guélin, A. Asensio Ramos, 2003, *A&AS*, en preparación

## PRESENTACIONES EN CONGRESOS INTERNACIONALES

1. "ISO detections of  $C_3$  and  $NH$  in Sgr B2"; **J.R. Goicoechea**, J. Cernicharo. 2000, en "ISO beyond the Peaks: The 2nd ISO workshop on analytical spectroscopy", eds. A. Salama, F. Kessler, K. Leech & B. Schultz, ESA SP-456, 99
2. "Far-IR detection of  $H_3O^+$  in Sgr B2 and its relation to  $H_2O$  abundance"; **J.R. Goicoechea**, J. Cernicharo. 2000, "XXXII<sup>nd</sup> Young European Radio Astronomers' Conference"
3. "Evolution of carbon-rich proto-planetary objects"; F. Herpin, **J.R. Goicoechea**, J. Cernicharo, J.R. Pardo. 2001, en "The Promise of Herschel Space Observatory", eds. G.L. Pilbratt, J. Cernicharo, A.M. Heras, T. Prusti & R. Harris, ESA SP-460, 249
4. "Spectroscopy of key molecular species in the far-Infrared"; **J.R. Goicoechea**, J. Cernicharo. 2001, en "The Promise of Herschel Space Observatory", eds. G.L. Pilbratt, J. Cernicharo, A.M. Heras, T. Prusti & R. Harris, ESA SP-460, 413
5. "The Millimeter and Submillimeter spectrum of CRL 618"; **J.R. Goicoechea**, J. Cernicharo, J.R. Pardo, M. Guélin, T.G. Phillips. 2001, en "The Promise of Herschel Space Observatory", eds. G.L. Pilbratt, J. Cernicharo, A.M. Heras, T. Prusti & R. Harris, ESA SP-460, 417
6. "The ISO/LWS spectrum of Sgr B2 region"; **J.R. Goicoechea**, J. Cernicharo. 2002, en "Exploiting the ISO Data Archive - Infrared Astronomy in the Internet Age", eds. C. Gry et al., ESA SP-511
7. "Extended photoionization and photodissociation in Sgr B2"; **J.R. Goicoechea**, N.J. Rodríguez-Fernández, J. Cernicharo. 2003, en Astron. Nachr., Vol. 324, No. S1 (2003), Special Supplement "The central 300 parsecs of the Milky Way", Eds. A. Coter, H. Falcke, T. R. Geballe, S. Markoff

# Bibliografía

- Acker, A., Marcout, J., Ochsenbein, F., *et al.* 1992, *Strasbourg - ESO catalogue of galactic planetary nebulae. Garching.*
- Akabane, K., Soufe, Y., Hirabayashi, H., Morino, M., & Inoue, M. 1988, *PASJ*, 40, 459
- Arnold, D.W., Bradforth, S.E., Kitsopoulos, T.N., & Neumark, D.M., 1991, *J.Chem.Phys.*, 95, 8753
- Bachiller, R., Forveille, T., Huggins, P.J., & Cox, P. 1997, *A&A*, 324, 1123
- Bally, J., Stark, A.A., Wilson, R.W. & Henkel, C. 1987, *ApJS*, 65, 13
- Bally, J., Stark, A.A., Wilson, R.W. & Henkel, C. 1988, *ApJ*, 324, 223
- Bates, D.R. 1986, *ApJ*, 306, L45
- Batrla, W., Walmsley, C. M., & Wilson, T. L. 1984, *A&A*, 136, 127
- Becklin, E. E., & Neugebauer, G. 1968, *A&A*, 151, 145
- Beintema, D. A., van den Ancker, M. E., Molster, F. J. *et al.* 1996, *A&A*, 315, L369
- Benson, J.M., & Johnston, K.J. 1984, *ApJ*, 277, 181
- Bell, M.B., Feldman, P.A., Kwok, S., & Matthews, H.E. 1982, *Nature*, 295, 385
- Bell, M.B., Feldman, P. A., Travers, M. J., *et al.* 1997, *ApJ*, 483, L61
- Bergin, E.A., Langer, W.D., & Goldsmith, P.F. 1995, *ApJ*, 441, 222
- Bergin, E.A., Melnick, G. J., Stauffer, J. R., *et al.* 2000, *ApJ*, 539, L129
- Bernard Salas, J., Pottasch, S. R., Beintema, D. A., & Wesselius, P. R. 2001, *A&A*, 367, 949
- Bernath, P.F., Hinkle, K.H., & Keady, J.J. 1989, *Science*, 244, 562
- Bernes, C. 1978, *Stockholm Observatory Report number 15*
- Bernes, C. 1979, *A&A*, 73, 67
- Betz, A.L., & Boreiko, R.T. 1989, *ApJ*, 346, L101
- Bieging, J. H. 1976, *A&A*, 51, 289
- Binney, J., Gerhard, O.E., Stark, A.A., Bally, J., & Uchida, K.I. 1991, *MNRAS*, 252, 210
- Bogey, M., Demuynck, C., Denis, M., & Destombes, J.L. 1985, *A&A*, 148, L11
- Botschwina, P., Rosmus, P., & Reinsch, E.A. 1983, *Chem.Phys.Lett.*, 102, 299
- Bowen, G.H 1988, *ApJ*, 329, 299
- Broten, N.W., *et al.* 1978, *ApJ*, 223, L105
- Bujarrabal, V., Cernicharo, J., Guélin, M 1983, *A&A*, 128, 355
- Bujarrabal, V., Gómez-González, J., Bachiller, R., *et al.* 1988, *A&A*, 204, 242
- Bujarrabal, V., & Alcolea, J. 1991, *A&A*, 251, 536
- Bujarrabal, V., Fuente, A., & Omont, A. 1994, *A&A*, 285, 247
- Bujarrabal, V., Castro-Carrizo, A., Alcolea, J., & Sánchez Contreras, C. 2001, *A&A*, 377, 868
- Burton, M.G., Hollenbach, D.J., & Tielens, A.G.G.M. 1990, *ApJ*, 365, 620

- Cameron, R. M. 1976, *Sky & Telescope*, 52, 327
- Carsenty, U., & Solf, J. 1982, *A&A*, 106, 307
- Castor, J.I. 1970, *MNRAS*, 149, 111
- Castro-Carrizo, A., Bujarrabal, V., Fong, D., *et al.* 2001, *A&A*, 367, 674
- Ceccarelli, C., Baluteau, Walmsley, *et al.* 2002, *A&A*, 383, 603
- Cernicharo, J., Kahane, C., Gómez-González, J., & Guélin, M. 1986, *A&A*, 167, L5
- Cernicharo, J., Guélin, M., Menten, K., & Walmsley, C.M. 1987, *A&A*, 181, L1
- Cernicharo, J., & Guélin, M. 1987, *A&A*, 183, L10
- Cernicharo, J., Guélin, M., Martín-Pintado, J., Peñalver, J., & Mauersberger, R. 1989, *A&A*, 222, L1
- Cernicharo, J., Thum, C., Hein, H., John, D., Garcia, P., & Mattioco, F. 1990, *A&A*, 231, L15
- Cernicharo, J., Gottlieb, C.A., Guélin, M., Killiam, T.C., Paubert, G., & Thaddeus, P. 1991a, *ApJ*, 368, L39
- Cernicharo, J., Gottlieb, C.A., Guélin, M., Killiam, T.C., Thaddeus, P., & Vrtilik, J.M. 1991b, *ApJ*, 368, L43
- Cernicharo, J., González-Alfonso, E., Alcolea, J., Bachiller, R., & John, D. 1994, *ApJ*, 432, L59
- Cernicharo, J., & Guélin, M. 1996, *A&A*, 309, L27
- Cernicharo, J., Barlow, M.J., González-Alfonso, E., *et al.* 1996, *A&A*, 315, L201
- Cernicharo, J., Bachiller, R., & González-Alfonso, E. 1996, *A&A*, 305, L5
- Cernicharo, J., Lim, T., Cox, P., *et al.* 1997a, *A&A*, 323, L25
- Cernicharo, J., Liu, X.W., González-Alfonso, E., Cox, P., Barlow, M.J., Lim, T., & Swinyard, B.M. 1997, *ApJ*, 483, L65
- Cernicharo, J., González-Alfonso, E., Sempere, M. J. *et al.* 1999, en *"The Universe as seen by ISO"*, ed. P. Cox & F. Kessler, ESA SP-427, 565
- Cernicharo, J., Yamamura, I., González-Alfonso, E., *et al.* 1999, *ApJ*, 526, L41
- Cernicharo, J., Goicoechea, J.R., & Caux, E. 2000, *ApJ*, 534, L199
- Cernicharo, J., Guélin, M., & Kahane, C. 2000, *A&AS*, 142, 181
- Cernicharo, J., Heras, A.M., Tielens, A.G.G.M., *et al.* 2001a, *ApJ*, 546, L123
- Cernicharo, J., Heras, A.M., Pardo, J.R., *et al.* 2001b, *ApJ*, 546, L127
- Cernicharo, J., Goicoechea, J.R., Pardo, J.R., *et al.* 2003, *ApJ*, en prensa
- Cesarsky, C. J., Abergel, A., Agnese, P., *et al.* 1996, *A&A*, 315L, 32
- Chandrasekhar, S. 1960, *Radiative Transfer* (Dover)
- Chernchneff, I., & Glassgold A.E. 1993, *ApJ*, 419, L41
- Cheung, A.C., Rank, D.M., Townes, C.H., Thornton, D.D., & Welch, W.J. 1969, *Nature*, 221, 626
- Chiar, J.E., Tielens, A.G.G.M., Whittet, D.C.B., *et al.* 2000, *ApJ*, 537, 749
- Clegg, R.E.S., & Lambert, D.L. 1982, *MNRAS*, 201, 723
- Clegg, P.E., *et al.* 1996, *A&A*, 315, L38
- Comito, C., Schilke, P., Gerin, M., Phillips, T. G., Zmuidzinas, J., & Lis, D. C. 2003, *A&A*, 402, 635
- Cox, P., & Laureijs, R. 1989, en *"The Center of the Galaxy"*, ed. Morris, M., IAU, Sym.No. 136, 121
- Cox, P., González-Alfonso, E., Barlow, M.J., *et al.* 1996, *A&A*, 315, L265
- Cox, P., Maillard J.P., Huggins, P.J., *et al.* 1997, *A&A*, 321, 907
- Cox, P., Lucas, R., Huggins, P.J., *et al.* 2000, *A&A*, 353, L25
- Crampton, D., Cowley, A.P., & Humphreys, R.M. 1975, *ApJ*, 198, L135
- Crosas, M. & Menten, K.M. 1997, *ApJ*, 483, 913
- Cummins, S. E., Thaddeus, P., & Linke, R. A. 1986, *ApJS*, 60, 819

- Dalgarno, A., & Black, J.H. 1976, *Rep.Prog.Phys.*, 39, 573
- Deguchi, S., Izumiura, H., Kaifu, N., Mao, X., *et al.* 1990, *ApJ*, 351, 522
- Demyk, K., Jones, A.P., Dartois, E., & D'Hendecourt, L. 1999, *A&A*, 349, 267
- de Graaw, T. *et al.* 1996, *A&A*, 315, L49
- de Pree, C.G., Gaume, R.A., Goss, W.M., & Claussen, M.J. 1996, *ApJ*, 464, 788
- de Pree, C.G., Goss, W.M., & Gaume, R.A. 1996, *ApJ*, 500, 847
- de Vicente, P., Martín-Pintado, J., Wilson, T.L. 1997, *A&A*, 320, 957
- de Vicente, P., Martín-Pintado, J., Neri, R., & Colom, P. 2000, *A&A*, 361, 1058
- Dominik, C., Sedlmayr, E., & Gail, H.H. 1993, *A&A*, 277, 578
- Douglas, A.E. 1951, *ApJ*, 114, 446
- Douglas, A.E. 1977, *Nature*, 269, 130
- Dowell, C.D. 1997, *ApJ*, 487, 237
- Dowell, C.D., Hildebrand, R. H., Schleuning, *et al.* 1998, *ApJ*, 504, 588
- Downes, D., Goss, W. M., Schwarz, U. J., & Wouterloot, J. G. A. 1979, *A&AS*, 35, 1
- Draine, B.T., Roberge, W.G., & Dalgarno, A. 1983, *ApJ*, 264, 485
- Draine, B.T., & Lee, H.M. 1984, *ApJ*, 285, 89
- Draine, B.T. 1985, *ApJ*, 57, 587
- Draine, B.T. 1989, en "*Infrared Spectroscopy in Astronomy*", ed. Kaldeich B.H., ESA SP-290, 93
- Dunham, T.Jr. 1937, *PASP*, 49, 26
- Eckart, A., & Genzel, R. 1997, *MNRAS*, 284, 576
- Erickson, E.F., Caroff, L.J., Simpson, J.P., Strecker, D. W., & Goorvitch, D. 1977, *ApJ*, 216, 404
- Ferland, G.J. 1996, *A Brief Introduction to Cloudy, University of Kentucky, Internal Report*
- Figer, D.F., Sungsoo, K.S., Morris, M., *et al.* 1999, *ApJ*, 525, 750
- Fixsen, D.J., Cheng, E.S., Cottingham, D.A., *et al.* 1994, *ApJ*, 420, 457
- Flower, D.R., Pineau des Forêts, G. & Walmsley, M.C. 1995, *A&A*, 294, 815
- Foing, B., & Ehrenfreund P. 1994, *Nature*, 369, 296
- Fong, D., Meixner, M., Castro-Carrizo, A., *et al.* 2001, *A&A*, 367, 652
- Frank, A., Balick, B., Icke, V., & Mellema, G. 1993, *ApJ*, 404, L25
- Fulara, J., Lessen, D., Freivogel, P., & Maier J.P. 1993, *Nature* 336, 439
- Galloway, T., & Herbst, E. 1991, *ApJ*, 376, 531
- Gardner, F. F., Whiteoak, J. B., Forster, J. R., & Pankonin, V. 1986, *MNRAS*, 218, 385
- Gaume, R.A., & Claussen, M.J. 1990, *ApJ*, 351, 538
- Gaume, R.A., Claussen, M.J., De Pree, C.G., *et al.* 1995, *ApJ*, 449, 663
- Gendriesch, R., Lewen, F., Winnewisser, G., & Müller, H.S.P. 2001, *J.Mol.Struct.*, 599, 293
- Genzel, R., & Downes, D. 1977, *A&AS*, 30, 145
- Genzel, R., Ho, P. T. P., Bieging, J., & Downes, D. 1982, *ApJ*, 259, L103
- Glassgold A.E., & Mamon G.A. 1993, *ApJ*, 410, 188
- Glassgold, A.E. 1996, *ARA&A*, 34, 241
- Glassgold, A.E. 1999, en "*Asymptotic Giant Branch stars*". eds. T. Le Bertre, A. Lebre and C. Waelkens. *IAU Symposium 191*, 337
- Goicoechea, J.R., & Cernicharo, J. 2001, *ApJ*, 554, L213

- Goicoechea, J.R., & Cernicharo, J. 2002, *ApJ*, 576, L77
- Goicoechea, J.R., Rodríguez-Fernández, N.J. & Cernicharo, J. 2003, *ApJ*, en prensa
- Goldsmith, Snell, R.L., & Lis, D.C. 1987, *ApJ*, 313, L5
- Goldsmith, P.F., Lis, D., Hills, R., Lasenby, J. 1990, *ApJ*, 350, 186
- Goldsmith, P.F., Lis, D., Lester, D.F., & Harvey, P.M. 1992, *ApJ*, 389, 338
- Goldsmith, P.F., Bergin, E.A., & Lis, D. 1997, *ApJ*, 491, 615
- Goldsmith, P. F., Melnick, G. J., Bergin, E. A., *et al.* 2000, *ApJ*, 539, L123
- González-Alfonso E., & Cernicharo J. 1993, *A&A*, 279, 506
- González-Alfonso E., Cernicharo J., Bachiller, R., & Fuente, A. 1995, *A&A*, 293, L9
- González-Alfonso E. 1995, Tesis Doctoral, Univesidad de Valencia
- González-Alfonso, E., Cernicharo, J., van Dishoeck, E.F., *et al.* 1998, *ApJ*, 502, L69
- González-Alfonso, E. & Cernicharo, J. 1999, *ApJ*, 525, 845
- González-Alfonso, E. & Cernicharo, J. 1999b, en "*The Universe as seen by ISO*", ed. P. Cox & F. Kessler, ESA SP-427, 325
- Gordon, M.A., Berkemann, U., Mezger, P.G., *et al.* 1993, *A&A*, 280, 208
- Gordon, M.A. 1995, *A&A*, 301, 853
- Graf, S., Geiss, J., & Leutwyler, S. 2001, *J.Chem.Phys.*, 114, 4542
- Graham, W.R., Dismuke, K.L., y Weltner, W. Jr. 1976, *ApJ*, 204, 301
- Greaves, J. S., & Williams, P.G. 1994, *A&A*, 290, 259
- Greaves, J. S., Holland, W. S., Murray, A. G., & Nartallo, R. 1995, *MNRAS*, 272, L1
- Greaves, J. S., & Nyman, L.-A. 1996, *A&A*, 305, 950
- Green, S., & Thaddeus, P. 1976, *A&A*, 205, 766
- Green, S., *et al.* 1976, *J.Chem.Phys.*, 17, 479
- Green, S., & Chapman, S. 1978, *ApJS*, 37, 169
- Green, S., Maluendes, S., & McLean, A. D. 1993, *ApJS*, 85, 181
- Groenewegen, M.A.T., van der Veen, W. E. C. J., & Matthews, H. E. 1998, *A&A*, 338, 491
- Gry, C., Swinyard, B., Harwood, A., *et al.* 2002, *The ISO Handbook, Volume III: - The Long Wavelength Spectrometer.*
- Guélin, M., Mezaoui, A., & Friberg, P. 1982, *A&A*, 109, 23
- Guélin, M., Cernicharo, J., Kahane, C., Gómez-González, J., & Walmsley, C.M. 1987, *A&A*, 175, L5
- Guélin M., Lucas R., & Cernicharo J. 1993, *A&A*, 280, L19
- Guélin, M., Cernicharo, J., Travers, M.J., *et al.* 1997, *A&A*, 317, L1
- Gurzadyan, G.A. 1997, "*The Physics and Dynamics of Planetary Nebulae*", Springer-Verlag
- Güsten, R., Walmsley, C.M., & Pauls, T. 1981, *A&A*, 103, 197
- Güsten, R. 1989, en "*The Center of the Galaxy*", ed. Morris, M., IAU, Sym. 136, 89
- Habing, H. J. 1968, *Bulletin of the Astronomical Institute of the Netherlands*, 19, 421
- Hajian, A. R., Phillips, J. A., & Terzian, Y. 1996, *ApJ*, 467, 341
- Handa, T., Sofue, Y., Nakai, N., *et al.* 1987, *PASJ*, 39, 709
- Harvey, P.M., Campbell, M.F., & Hoffmann, W.F. 1977, *ApJ*, 211, 786
- Hasegawa, T., Sato, F., Whiteoak, J.B., & Miyawaki R. 1994, *ApJ*, 429, L77
- Hasegawa, T., Volk, K., & Kwok S. 2000, *ApJ*, 532, 994
- Heath, J.R., & Saykally, R.J. 1991, *J.Chem.Phys.*, 94, 3271



- Heiles, C. 1994, *ApJ*, 436, 720
- Heiligman, G.M. 1987, *ApJ*, 314, 747
- Helmich, F. P., van Dishoeck, E. F., & Jansen, D. J. 1996, *A&A*, 313, 657
- Herbst, E., & Leung, C.M. 1989, *ApJS*, 69 271
- Herpin, F., & Cernicharo, J. 2000, *ApJ*, 530, L129
- Hildebrand, R.H. 1983, *QJRAS*, 24, 267
- Hildebrand, R.H. 1988, *QJRAS*, 29, 327
- Hinkle, K.W., Keady, J.J., & Bernath, P.F. 1988, *Science*, 241, 1319
- Höfner, S., Jorgesen, U.G., Loidl, R. & Aringer, B. 1998, *A&A*, 340, 497
- Hollenbach, D. & McKee, C.F. 1989, *ApJ*, 342, 306
- Hollenbach, D., Takahashi, T., & Tielens, A.G.G.M. 1991, *ApJ*, 377, 192
- Hollenbach, D., Johnstone, Liziano, S., & Shu, F. 1994, *ApJ*, 428, 654
- Hollis, J.M., & Churchwell, E.B. 1983, *ApJ*, 271, 170
- Hollis, J.M., Churchwell, E.B., Herbst, E., & De Lucia, F.C. 1986, *Nature*, 322, 524
- Hora, J.L., Deutsch, L.K., Hoffmann, W.F., & Fazio, G.G. 1996, *AJ*, 112, 2064
- Hoyle, F. & Wickramasinghe, N.C. 1991, *"The Theory of cosmic grains"*, Kluwer Academic Publishers.
- Hüttemeister, S., Wilson, T.L., Henkel, C., & Mauersberger, R. 1993, *A&A*, 276, 445
- Hüttemeister, S., Wilson, T.L., Bania, T.M., & Martín-Pintado, J. 1993, *A&A*, 280, 255
- Hüttemeister, S., Wilson, T. L., Mauersberger, R., Lemme, C., Dahmen, G., & Henkel, C. 1995, *A&A*, 294, 667
- Jacq, T., Henkel, C., Walmsley, C. M., Jewell, P. R., & Baudry, A. 1988, *A&A*, 199, L5
- Jacq, T., Walmsley, C. M., Henkel, C., Baudry, A., Mauersberger, R., & Jewell, P. R. 1990, *A&A*, 228, 447
- Jacox, M.E. 1975, *J.Chem.Phys.*, 7, 424
- Jamiet, P.A., Danchi, W.C., Sutton, E.C., *et al.* 1991, *ApJ*, 380, 461
- Jamiet, P.A., Danchi, W.C., Sandell, G., & Sutton, E.C. 1992, *ApJ*400, 535
- Jensen, M. J., Bilodeau, R. C., Safvan, C. P., *et al.* 2000, 543, 764
- Joblin, C., Boissel, P., Leger, A., *et al.* 1995, *A&A*, 299, 835
- Jura, M., & Kroto, H. 1990, *ApJ*, 351, 222
- Justtanont, K., Tielens, A.G.G.M., Skinner, C.J., & Haas, M.R. 1997, *ApJ*, 476, 319
- Justtanont, K., Barlow, M.J., Tielens, A.G.G.M., *et al.* 2000, *A&A*, 360, 1117
- Kahane, C., Dufour, E., Busso, M. *et al.* 2000, *A&A*357, 669
- Kane, B.D., Clemens, D.P., Barvainis, R., & Leach, R.W. 1993, *ApJ*, 411, 708
- Kaufman, M.J., Wolfire, M.G., Hollenbach, D.J., & Luhman, M.L. 1999, *ApJ*, 527, 795
- Kerr, F. J., & Lynden-Bell, D. 1986, *MNRAS*, 221, 1023
- Kessler, M.F., *et al.* 1996, *A&A*, 315, L27
- Ketvirtis, A.E., & Simons, J. 1999, *J.Phys.Chem.A*, 103, 6552
- Klaus, T., Takano, S., & Winnewisser, G. 1997, *A&A*, 322, L1
- Knapp, G.R., Rauch, K.P., & Wilcots, E.M. 1990, *en "Evolution of the ISM", ed. L. Blitz, ASP Conf. Series 12 (San Francisco: ASP)*, 151
- Kobayashi, H., *et al.* 1989, *PASJ*, 41, 141
- Kooi, J.W., Kawamura, J., Chen, J., *et al.* 2000, *Int. J. of Infrared and Millimeter Waves*, 21, 9
- Koyama, K., Maeda, Y., Sonobe, T., Takeshima, T., Tanaka, Y., & Yamauchi, S. 1996, *PASJ*, 48, 249

- Kuan, Y.-J., Mehringer, D.M., & Snyder, L.E. 1996, *ApJ*, 459, 619
- Kurtz, J., & Adamowicz, L. 1991, *ApJ*, 370, 784
- Kurtz, S., Cesaroni, R., Churchwell, E., Hofner, P., & Walmsley, C. M. 2000, en "*Protostars and Planets IV*", eds. V. Mannings, A. P. Boss, & S. S. Russell (Tucson: Univ. of Arizona Press), 299
- Kwok, S. 1982, *ApJ*, 258, 280
- Kwok, S. 1993, *ARA&A*, 31, 63
- Kwok, S. 1994, "*Planetary Nebulae: A modern view*", *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 106, 344
- Kwok, S. 2000, "*The origin and evolution of planetary nebulae*", *Cambridge University Press*.
- Kwok, S., Su, K.Y.L., & Stoesz, J.A. 2001, en *Post-AGB objects as a phase of stellar evolution*, edited by R. Szczerba and S.K. Gorny, *Astrophys. and Space Science Library*, vol. 265
- Lamers, H.J.G.L.M., & Cassinelli, J.P. 1999, "*Introduction to Stellar winds*", *Cambridge University Press*.
- Latter, W.B., Dayal, A., Bieging, J.H., et al. 2000, *ApJ*, 539, 783
- Léger, A., d'Hendecourt, L., & Défourneau, D. 1995, *A&A*, 293, L53
- Lemke, D., Klaas, U., Abolins, J., et al. 1996, *A&A*, 315, L64
- Lien, D. J. 1984, *ApJ*, 284, 578
- Lis, D.C., & Goldsmith, P.F. 1989, *ApJ*, 337, 704
- Lis, D.C., & Goldsmith, P.F. 1990, *ApJ*, 356, 195
- Lis, D.C., & Goldsmith, P.F. 1991, *ApJ*, 369, 157
- Lis, D. C., Carlstrom, J. E., Keene, J. 1991, *ApJ*, 380, 429
- Lis, D.C., Goldsmith, P.F., Carlstrom, J.E. & Scoville, N.Z. 1993, *ApJ*, 402, 238
- Lis, D.C., & Carlstrom, J.E. 1994, *ApJ*, 424, 189
- Lis, D.C., & Menten, K.M. 1998, *ApJ*, 507, 794
- Lis, D.C., Serabyn, E., Keene, J., et al. 1998, *ApJ*, 509, 299
- Lis, D.C., Keene, J., Phillips, T. G., Schilke, P., Werner, M.W., & Zmuidzinas, J. 2001b, *ApJ*, 561, 823
- Listz, H.S. 1992, *ApJS*, 82, 495
- Liu, D.J., & Oka, T. 1985, *Phys.Rev.Lett.*, 54(16), 1787
- Liu, X.W., Barlow, M.J., Nguyen-Q-Rieu, et al. 1996, *A&A*, 315, L257
- Liu, X.W., Barlow, M.J., Dalgarno, A., et al. 1997, *MNRAS*, 290, L71
- Liu, X.W., Barlow, M. J., Cohen, M., et al. 2001, *MNRAS*, 323, 343
- Loup, C., Forveille, T., Omont, A., & Paul, J.F. 1993, *A&AS*, 99, 291
- Lucas, R., & Guélin, M. 1999, en *Asymptotic giant branch stars, IAU symposium 191*, published by the *Astronomical Society of the Pacific*, 305
- Lugten, J. B., Stacey, G. J., & Genzel, R. 1986, *Bulletin of the American Astronomical Society*, Vol. 18, p.1007
- Maier, J.P., Lakin, N.M., Walker, G.A.H., & Bohlender, D.A. 2001, *ApJ*, 267
- Malhotra, S., Kaufman, M. J., Hollenbach, D., et al. 2001, *ApJ*, 561, 766
- Martin, A.H.M., & Downes, D. 1972, *ApJ*, 11, L219
- Martin, J.M.L., Francois, J.P., & Gijbels, R. 1991, *J.Chem.Phys.*, 94, 3753
- Martin, J.M.L., El-Yazal, J., & Francois, J.P. 1995, *Chem.Phys.Lett.*, 242, 570
- Martín-Pintado, J., de Vicente, P., Wilson, T.L. & Johnston, K.J. 1990, *ApJ*, 236, 193
- Martín-Pintado, J., Gaume, R. A., Johnston, K. J., & Bachiller, R. 1995, *ApJ*, 446, 687
- Martín-Pintado, J. Gaume, R.A., Johnston, K.J., Bachiller, R.
- Martín-Pintado, J., de Vicente, P., Fuente, A., & Planesas, P. 1997, *ApJ*, 482, L45

- Martín-Pintado, J., Gaume, R. A., Rodríguez-Fernández, N., de Vicente, P., & Wilson, T. L. 1999, *ApJ*, 519, 667
- Martín-Pintado, J., de Vicente, P., Rodríguez-Fernández, N., Fuente, A., & Planesas, P. 2000, *A&A*, 356, L5
- Martín-Pintado, J., Rizzo, J.R., de Vicente, P., Rodríguez-Fernández, N.J., & Fuente, A. 2001, *ApJ*, 548, L65
- Masson, C.R., Cheung, K.W., Berge, G.L., *et al.* 1985, *ApJ*, 292, 464
- Mathis, J.S., Rumpl, W., & Nordsieck, K.H. 1977, *ApJ*, 217, 425
- Mauron, N. 1997, *Ap&SS*, 251, 143
- Mauron, N., & Huggins, P.J. 1999, *A&A*, 349, 203
- McCabe, E.M., Cannon, Smith R., & Clegg, R.E.S. 1979, *Nature*, 281, 263
- McKellar, A. 1941, *PASP*, 52, 187
- Mehring, D. M., Yusef-Zadeh, F., Palmer, P., & Goss, W. M. 1992, *ApJ*, 401, 168
- Mehring, D. M., Palmer, P., Goss, W. M., & Yusef-Zadeh, F. 1993, *ApJ*, 412, 684
- Mehring, D. M., de Pree, C. G., Gaume, R. A., Goss, W. M., Claussen, M.J. 1995, *ApJ*, 442, L29
- Mehring, D. M., Menten, K.M. 1997, *ApJ*, 474, 346
- Mehring, D.M., & Menten, K. 1997, *ApJ*, 412, 684
- Meixner, M., Fong, D., Sutton, E.C., & Welch, W.J. 2001, *en Post-AGB objects as a phase of stellar evolution, edited by R. Szczerba & S.K. Gorny, Astrophys. and Space Science Library, vol. 265*
- Melnick, G.J., Genzel, R., & Lugten, J.B. 1987, *ApJ*, 321, 530
- Melnick, G.J., Stacey, G.J., Genzel, R., Lugten, J.B. & Poglitsch, A. 1990, *ApJ*, 348, 161
- Melnick, G.J., Stauffer, J.R., Ashby, M.L.N., *et al.* 2000, *ApJ*, 539, L77
- Men'shchikov, A.B., Bolega, Y., Blöcker, T. *et al.* 2001, *A&A*, 368, 497
- Menten, K., Melnick, G.J., Phillips, T.G., & Neufeld, D.A. 1990, *ApJ*, 363, L27
- Menten, K. & Melnick, G.J. 1991, *ApJ*, 377, 647
- Meyer, D.M., & Roth, K.C. 1991, *ApJ*, 376, L49
- Mezger, P.G. 1978, *A&A*, 70, 565
- Mezger, P.G., Duschl, W. J., & Zylka, R. 1996, *A&ARv*, 7, 289
- Mihalas, D. 1978, *Stellar Atmospheres (Springer)*
- Mikami H., Yamamoto S., Saito S. & Guélin M., 1989, *A&A*, 217, L5
- Millar, T.J., Bennett, A., Rawlings, J.M.C., Brown, P.D., & Chamley, S.B. 1991, *A&AS*, 87, 585
- Minh, Y.C., Irvine, W.M., & Ziurys, L.M. 1988, *ApJ*, 334, 175
- Moazzen-Ahmadi, N., Thong J.J., McKellar, A.R.W., 1994, *J.Chem.Phys.*, 100, 4033
- Moneti, A., Cernicharo, J., & Pardo, J.R. 2001, *ApJ*, 549, L203
- Morita, K., Hasegawa, T., & Ukita, N. 1992, *PASJ*, 44, 373
- Morris, M., Gilmore, W., Palmer, P. *et al.* 1975, *ApJ*, 199, L47
- Morris, M., Turner B.E., Palmer, P., & Zuckerman, B. 1976, *ApJ*, 205, 82
- Morris, M., Polsih, N., Zuckerman, B., & Kaifu, N. 1993, *ApJ*, 88, 1228
- Morris, M. 1993, *ApJ*, 408, 496
- Morris, M., & Serabyn, E. 1996, *ARA&A*, 34, 645
- Müller, H.S.P., Thorwirth, S., Roth, D. A., & Winnewisser, G. 2001, *A&A*, 370, L49
- Murakami, H., Bock, J., Freund, M.M. *et al.* 1994, *ApJ*, 428, 354
- Murakami, H., Koyama, K., Sakano, M., Tsujimoto, M., & Maeda, Y. 2000, *ApJ*, 534, 283.
- Murakami, H., Koyama, K., Sakano, M., & Maeda, Y. 2000, *ApJ*, 558, 687.

- Najarro, F. 2000, *New Astronomy Reviews*, 44, 213
- Neri, R., Garcia-Burillo, S., Guélin, M., Cernicharo, J., Guilloteau, S., & Lucas, R. 1992, *A&A*, 262, 544
- Neufeld, D.A., & Melnick, G.J. 1987, *ApJ*, 322, 266
- Neufeld, D.A., Leep, S., & Melnick, G.J. 1995 *ApJS*, 100, 132
- Neufeld, D.A., Zmuidzinas, J., Schilke, P., & Phillips, T.G. 1997, *ApJ*, 488, L141
- Neufeld, D.A., Ashby, M. L. N., Bergin, E.A. *et al.* 2000, *ApJ*, 539, L111
- Neufeld, D.A., Bergin, E.A., Melnick, G.J., & Goldsmith, P.F. 2003, *ApJ*, en prensa
- Neugebauer, G., Habing, H. J., van Duinen, R. *et al.* 1984, *ApJ*, 278, L1
- Novak, G., Dotson, J. L., Dowell, C. D., *et al.* 1997, *ApJ*, 487, 320
- Nummelin, A., Bergman, P., Hjalmarson, A., *et al.* 1998, *ApJS*, 117, 427
- Nummelin, A., Bergman, P., Hjalmarson, A., *et al.* 2000, *ApJS*, 128, 213
- Odenwald, S. F., & Fazio, G. G. 1984, *ApJ*, 283, 601
- Offer, A.R., & van Dishoeck, E.F. 1992, *MNRAS*, 257, 377 (OfD92)
- Offer, A.R., van Hemert, M.C., & van Dishoeck, E.F. 1994, *J.Chem.Phys.*, 100, 362 (OfHD94)
- Omont, A., Moseley, S.H., & Cox, P. 1995, *ApJ*, 454, 819
- Papoular, R. 1999, *A&A*, 346, 219
- Parasuk, V., & Almlöf, 1991, *J.Chem.Phys.*, 95, 8172
- Pardo, J.R., Cernicharo, J., Herpin, F., Kooi, J., & Phillips, T.G. 2001 *ApJ*, 562, 799
- Park, J.K. 1999, *Chem.Phys.Lett.*, 315, 119
- Penzias, A.A., & Wilson, R.W. 1965, *ApJ*, 142, 419
- Phillips, T.G., van Dishoeck, E.F., & Keene, J. 1992, *ApJ*, 399, 533 (PhvDK92)
- Pickett, H.M., Polynter, R.L., Cohen, E.A. *et al.* 1998, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 60, 883
- Pierce-Price, D., Richer, J.S., Greaves, J.S. *et al.* 2000, *ApJ*, 545, L121
- Pitzer, K.S. 1939, *J.Chem.Phys.*, 7, 251
- Pitzer, K.S., & Clementi E. 1959, *J.Am.Chem.Soc.*, 81, 4477
- Plummer, G.M., Herbst, E., & De Lucia, F.C. 1985, *J.Chem.Phys.*, 83, 1428
- Polehampton, E. T., Baluteau, J.-P., Ceccarelli, C., Swinyard, B. M., & Caux, E. 2002, *A&A*, 388, L44
- Polehampton, E. T. 2002, *Tesis Doctoral. Linacre College, Oxford*
- Polehampton, E. T., Brown, J.M., Swinyard, B. M., & Baluteau, J.-P. 2003, *A&A*, en prensa
- Reid, M. J., Schneps, M. H., Moran, J. M., Gwinn, C. R., Genzel, R., Downes, D., & Roennaeng, B. 1988, *ApJ*, 330, 809
- Reid, M. 1993, *ARA&A*, 31, 345
- Rodríguez-Fernández, N. J., Martín-Pintado, J., Fuente, A., *et al.* 2001, *A&A*, 365, 174
- Rodríguez-Fernández, N. J., Martín-Pintado, J., & de Vicente, P. 2001, *A&A*, 377, 631
- Rodríguez-Fernández, N. J., Martín-Pintado, J., Fuente, A., & Wilson, T. L. 2003, *Astron. Nachr.*, Vol. 324, No. S1, *Special Supplement "The central 300 parsecs of the Milky Way"*, Eds. Á. Coterá, H. Falcke, T. R. Geballe, S. Markoff
- Roelfsema, P.R., Goss, W.M., Whiteoak, J.B., Gardner, F.F., & Pankonin, V. 1987, *A&A*, 175, 219
- Rubin, R.H., Simpson, J.P., Lord, S.D., *et al.* 1994, *ApJ*, 420, 772
- Rubin, R.H. 1985, *ApJS*, 57, 349
- Sahai, R., Trauger, J.T., Watson, A.M., *et al.* 1998, *ApJ*, 493, 301
- Sato, F., Hasegawa, T., Whiteoak, J.B., *et al.* 2000, *ApJ*, 535, 857
- Schaerer, D., & de Koter, A. 1997, *A&A*, 322, 598

- Schmuttenmaer, C.A., Cohen, R.C., Pugliano, N. *et al.* 1990, *Science*, 249, 897
- Schödel, R., Ott, T., Genzel, R. *et al.* 2002, *Nature*, 419, 694
- Schönberner, D. 1983, *ApJ*, 272, 708
- Schultheis, M., Ganesh, S., Simon, G., *et al.* 1999, *A&A*, 349, L69
- Scoville, N.Z. 1972, *ApJ*, 175, L127
- Scoville, N.Z. 1972, *ApJ*, 175, L127
- Scoville, N.Z., Solomon, P.M. & Penzias, A.A. 1975, *ApJ*, 201, 352
- Scoville, N.Z., & Kwan, J. 1976, *ApJ*, 206, 718
- Shields, J. C. & Ferland, G. J. 1994, *ApJ*, 430, 236
- Simpson, J.P., Colgan, S.W.J., Cotera, A.S., Erickson, E.F., Haas, M.R., Morris, M., & Rubin, R.H. 1997, *ApJ*, 487, 689
- Skinner, C.J., Meixner, M., & Bobrowsky, M. 1998, *MNRAS* 300, L29
- Sobolev, V.V. 1958, en "*Theoretical Astrophysics*", ed. Ambartsumyan, Pergamon Press Ltd., London. Cap. 29 ,
- Sobolev, V.V. 1960, *Moving Envelopes of Stars*, Harvard University Press
- Sofue, Y. 1990, *PASJ*, 42, 827
- Spaans, M., & van Dishoeck, E.F. 2001, *ApJ*, 548, L217
- Speck, A.K., Meixner, M., & Knapp, G.R. 2000, *ApJ*, 545, L145
- Spitzer, L. 1978, "*Physical Processes in the Interstellar Medium*" (New York: Wiley), 232-44, 291-3
- Stacey, G.J., Lugten, J. B., & Genzel, R. 1987, *ApJ*, 313, 859
- Sternberg, A., Dalgarno, A., & Lepp, S. 1987, *ApJ*, 320, 676
- Sternberg, A., & Dalgarno, A. 1995, *ApJS*, 99, 565
- Storey, J., Watson, D.M., & Townes, C.H. 1981, *ApJ*, 244, L27
- Sutton, E. C., Jaminet, P. A., Danchi, W. C., Blake, & G.A. 1991, *ApJS*, 77, 255
- Swings, P., McKellar, A., & Minkowski, R. 1943, *ApJ*, 98, 142
- Swings, P., & Rosenfeld, L. 1937, *ApJ*, 86, 483
- Swinyard, B.M., Clegg P.E., Ade P.A.R., *et al.* 1996, *A&A*, 315, L43.
- Swinyard, B.M., *et al.* 1998, *SPIE*, 3354, 888
- Taylor, T.R., Xu, C., & Neumark, D.M. 1998, *J.Chem.Phys.*, 108, 10018
- Taylor, T.R., & Martin, J.M.L. 1996, *J.Chem.Phys.*, 100, 6047
- Telesco, C.M., Dressel, L.L., & Wolstencroft, R.D. 1993, *ApJ*, 414, 120
- Tieftrunk, A., Pineau des Forets, G., Schilke, P., & Walmsley, C. M. 1994, *A&A*, 289, 579
- Thorwirth, S., Wyrowski, F., Schilke, P., *et al.* 2003, *ApJ*, 586, 338
- Thronson, H.A., & Harper, D.A. 1986, *ApJ*, 300, 396
- Tielens, A. G. G. M., & Hollenbach, D. 1985, *ApJ*, 291, 722
- Timmermann, R., Nikola, T., Poglitsch, A., Geis, N., Stacey, G.J., & Townes, C.H. 1996, *ApJ*, 463, L109
- Trammell, S.R., Dinnerstein, H.L., & Goodrich, R.W. 1995, *AJ*, 108, 984
- Takagi, S-I., Murakami, H., & Koyama, K. 2002, *ApJ*, 573, 275
- Tsuji, T. 1973, *A&A*, 23, 411
- Turner, B.E. 1971, *ApJ*, 163, L35
- Vallée, J. 2002, *ApJ*, 566, 261
- van Dishoeck, E.F., & Black, J.H. 1986, *ApJS*, 62, 109

- van Dishoeck, E.F., Jansen, D.J., Schilke, P., & Phillips, T. G. 1993, *ApJ*, 416, L83
- van Dishoeck, E.F., & Tielens, A.G.G.M. 2001, en "The Century of Space Science", eds. J. Bleeker, J. Geiss & M.C.E. Huber, (Dordrecht: Kluwer)
- van Orden, A., Cruzan, J.D., Provencal, R.A., *et al.* 1995, en Astron. Soc. of the Pacific, "Airborne Astronomy Symposium on the Galactic Ecosystem: From Gas to Stars to Dust", 73, 67
- van Orden, A., & Saykally, R.J. 1998, *Chem.Rev.*, 98, 2313
- Vastel, C., Polehampton, E. T., Baluteau, J.-P., Swinyard, B. M., Caux, E., & Cox, P. 2002, *ApJ*, 581, 315
- Vejby-Christensen, L., Andersen, L.H., Heber, O., *et al.* 1997, *ApJ*, 483, 531
- Verhoeve, P., Versluis, M., Ter Meulen, J.J., Meerts, W.L., & Dymanus, A. 1989, *Chem.Phys.Lett.*, 161, 195
- Viscuso, P.J., Stacey, G. J., Harwit, M., *et al.* 1985, *ApJ*, 296, 149
- Vogel, S.N., Genzel, R., & Palmer, P. 1987, *ApJ*, 316, 243
- Volk, K., & Kwok, S. 1997, *ApJ*, 477, 722
- Wagenblast, R., Williams, D. A., Millar, T. J., & Nejad, L. A. M. 1993, *MNRAS*, 260, 420
- Wannier, P.G. 1989, en "The Center of the Galaxy", ed. Morris, M., IAU, Sym.No. 136, 107
- Watson, D.M., Genzel, R., Townes, C.H., & Storey, J.W.V. 1985, *ApJ*, 298, 316
- Watts, J.D., Gauss, J., Stanton, J.F., & Bartlett, R.J. 1992, *J.Chem.Phys.*, 97, 11, 8372
- Weinreb, S., Barret A.H., Meeks, M.L., & Henry, J.C. 1963, *Nature*, 200, 829
- Weliachew, L. 1971, *ApJ*, L47
- Weltner, W. & Van Zee, R.J. 1989, *J.Chem.Rev.*, 89, 1713
- Whiteoak, J. B., & Gardner, F. F. 1981, *MNRAS*, 197, 39
- Williams, T.L., Adams, N.G., Babcock, L.M., Herd, C.R., & Geoghegan, M. 1996, *MNRAS*, 282, 413
- Wilson, T.L., Ruf, K., Walmsley, C.M., *et al.* 1982, *A&A*, 115, 185
- Withey, P.A., Shen, L.N., & Graham, W.R.M. 1991, *J.Chem.Phys.*, 95, 820
- Wolfire, M.G., Tielens, A. G. G. M., & Hollenbach, D. 1990, *ApJ*, 358, 116 (WTH90)
- Wood, D.O.S., & Churchwell, E. 1989, *ApJS*, 69, 831
- Wootten, A., Boulanger, F., Bogey, M., Combes, F., Encrenaz, P.J., Gerin, M., & Ziurys, L. 1986, *A&A*, 166, L15
- Wootten, A., Mangum, J.G., Turner, B.E., *et al.* 1991, *ApJ*, 380, L79
- Wright, C.M., van Dishoeck, E.F., Black, J.H., *et al.* 2000, *A&A*, 358, 689
- Wyrowski, F., Schilke, P., Thorwirth, S., Menten, K. M., Winnewisser, G. 2003, *A&A*, 586, 344
- Xu C., Burton G.R., Taylor T.R., & Neumark D.M., 1997, *J.Chem.Phys.*, 107, 3428
- Yamamoto, S., Saito, S., Guélin M., *et al.* 1987, *ApJ*, 323, L149
- Yamamura, I., Shibata, K.M., Kasuga, T., & Deguchi, S. 1994, *ApJ*, 427, 406
- Yamamura, I., Onaka, T., Kamijo, F., Deguchi, S., & Ukita, N. 1996, *ApJ*, 465, 926
- Yan, M., Federman, S.R., Dalgarno, A., & Bjorkman, J.E. 1999, *ApJ*, 515, 640
- Young, K., Serabyn, G., Phillips, T.G., *et al.* 1992, *ApJ*, 385, 265
- Zmuidzinas, J., Blake, G. A., Carlstrom, J.K., Keene, J., Miller, D., Schilke, P., Ugras, N. G. 1995, *In Astronomical Society of the Pacific, Airborne Astronomy Symposium on the Galactic Ecosystem: From Gas to Stars to Dust*, 73, 33-40
- Zuckerman, B., Gilray, D.P., Turner, B.E., *et al.* 1976, *ApJ*, 205, L15
- Zuckerman, B., & Aller, L.H. 1986, *ApJ*, 301, 772
- Zylka, R., Guesten, R., Henkel, C., & Batrla, W. 1992, *A&AS*, 96, 525

# Lista de Figuras

1.1	Esquema del telescopio ISO. . . . .	16
2.1	Transiciones radiativas y colisionales entre dos niveles moleculares . . . . .	21
2.2	Representación esquemática de la solución de la ETR . . . . .	24
2.3	Parámetros de una línea espectral en absorción . . . . .	26
2.4	Notación empleada en la resolución de la ETR en geometría esférica . . . . .	28
2.5	Notación empleada en la aproximación LVG . . . . .	30
2.6	Modelos MonteCarlo para CO en la nube de Bernes . . . . .	35
3.1	Emisión molecular y radiocontinuo del CG . . . . .	42
3.2	Diagrama posición-velocidad del $^{13}\text{CO}$ en el CG . . . . .	44
3.3	órbitas $x_1$ y $x_2$ en un potencial barrado . . . . .	45
3.4	Imagen del cúmulo de los Arcos con HST/NICMOS . . . . .	46
3.5	Mapas de Sgr B2 a 1100 y 100 $\mu\text{m}$ . . . . .	51
3.6	Mapas de Sgr B2 a 1.3 y 20 cm . . . . .	53
3.7	Mapa de Sgr B2 a 350 $\mu\text{m}$ . . . . .	57
3.8	Mapa de la polarización en Sgr B2 a 115 $\mu\text{m}$ . . . . .	60
3.9	Mapa de Sgr B2 en $\text{C}^{18}\text{O}$ $J=3-2$ . . . . .	62
3.10	Diagrama de la línea de mirada hacia Sgr B2 . . . . .	65
3.11	Esquema de las diferentes componentes en Sgr B2 . . . . .	66
4.1	Espectro LWS/grating de Sgr B2(M) y principales detecciones con LWS/FP . . . . .	68
4.2	Líneas detectadas con el LWS/FP en Sgr B2(M) . . . . .	69
4.3	Ajuste de la emisión del continuo de Sgr B2(M) en el IR-lejano . . . . .	76
4.4	Líneas de $\text{H}_3\text{O}^+$ detectadas en Sgr B2(M) . . . . .	78
4.5	Diagrama de niveles de $\text{H}_3\text{O}^+$ en el modo $\nu_2$ ( $0^+ \rightarrow 0^-$ ) . . . . .	79
4.6	Líneas de $\text{H}_2^{16}\text{O}$ y $\text{H}_2^{18}\text{O}$ detectadas Sgr B2(M) . . . . .	86
4.7	Mapa de la línea $3_{13}-2_{20}$ de $\text{H}_2\text{O}$ a 183 GHz alrededor de Sgr B2(M) . . . . .	89
4.8	Mapas en velocidades de la línea $3_{13}-2_{20}$ de $\text{H}_2\text{O}$ a 183 GHz . . . . .	90
4.9	Modelos no-locales de $\text{H}_2\text{O}$ en Sgr B2(M) (a) . . . . .	92
4.10	Modelos no-locales de $\text{H}_2\text{O}$ en Sgr B2(M) (b) . . . . .	93
4.11	Modelos no-locales de $\text{H}_2\text{O}$ en Sgr B2(M) (c) . . . . .	94
4.12	Líneas de $^{16}\text{OH}$ y $^{18}\text{OH}$ detectadas en Sgr B2(M) . . . . .	98
4.13	Esquema del modelo geométrico para $^{16}\text{OH}$ en Sgr B2(M) . . . . .	100
4.14	Modelos no-locales de $^{16}\text{OH}$ en Sgr B2(M) . . . . .	102
4.15	Líneas de $\text{C}_3$ detectadas en Sgr B2(M) . . . . .	107

4.16 Modelos no-locales de $C_3$ en Sgr B2(M) . . . . .	108
5.1 Posiciones observadas con ISO sobre un mapa a $60\ \mu\text{m}$ con IRAS. . . . .	114
5.2 Observaciones ISO/LWS de la región extensa de Sgr B2 . . . . .	121
5.3 Líneas de estructura fina de $O^{++}$ , $C^+$ y $O^0$ en la región Sgr B2 . . . . .	124
5.4 Resultados de los modelos de fotoionización en la región de Sgr B2 . . . . .	126
5.5 Correlación entre la emisión de $C^+$ y $N^+$ en la región de Sgr B2 . . . . .	128
5.6 Modelos de PDR y espacio de parámetros ocupados por Sgr B2 . . . . .	129
5.7 Correlaciones entre OH y el continuo en el IR-lejano, y entre $O^0$ y OH . . . . .	133
5.8 Absorción extensa de OH, CH y $H_2O$ en la región de Sgr B2 . . . . .	135
5.9 Diagrama de los niveles de energía de $NH_2$ . . . . .	138
5.10 Absorción extensa de OH, $N^+$ y $U117$ en la región de Sgr B2 . . . . .	140
6.1 Evolución post-AGB sobre un diagrama H-R . . . . .	152
6.2 Imágenes con el HST de CRL 2688, CRL 618 y NGC 7027 . . . . .	155
6.3 Posición en un diagrama H-R de CRL 2688, CRL 618 y NGC 7027 . . . . .	156
7.1 CO $J=1-0$ , $2-1$ , $3-2$ , $4-3$ , $6-5$ y $7-6$ en CRL 2688, CRL 618 y NGC 7027 . . . . .	160
7.2 Líneas LWS/FP de CO $J=16-15$ , $19-18$ , $24-23$ , $26-25$ en CRL 2688. . . . .	166
7.3 Detección de la línea HCN $J=18-17$ en CRL 2688. . . . .	167
7.4 Esquema del modelo utilizado para la envoltura de CRL 2688 . . . . .	168
7.5 Observaciones y modelos de CRL 2688, CRL 618 y NGC 7027 . . . . .	170
7.6 Esquema del modelo utilizado para la envoltura de CRL 618 . . . . .	173
7.7 Componentes de la emisión de $HC_3N$ en CRL 618 . . . . .	177
7.8 Líneas rotacionales puras de $HC_3N$ en diferentes estados vibracionales . . . . .	178
7.9 Parte del survey espectral de CRL 618 a $\lambda=3\ \text{mm}$ . . . . .	179
7.10 Parte del survey espectral de CRL 618 a $\lambda=2\ \text{mm}$ . . . . .	180
7.11 Parte del survey espectral de CRL 618 a $\lambda=1\ \text{mm}$ . . . . .	181
7.12 Espectro LWS de IRC+10216, CRL 2688, CRL 618 y NGC 7027 . . . . .	182
7.13 Esquema del modelo utilizado para la envoltura de NGC 7027 . . . . .	184
8.1 Geometría de algunas cadenas $C_n$ en su configuración de baja energía . . . . .	193
8.2 Líneas R(2) y R(4) del modo $\nu_2$ de $C_3$ en IRC+10216 . . . . .	195
8.3 Espectro entre $53-62\ \mu\text{m}$ de varios objetos. ¿ $C_4$ ? . . . . .	199
A.1 Modelos no-locales A.1 de $^{16}\text{OH}$ en Sgr B2 . . . . .	216
A.2 Modelos no-locales A.2 de $^{16}\text{OH}$ en Sgr B2 . . . . .	217
A.3 Modelos no-locales A.3 de $^{16}\text{OH}$ en Sgr B2 . . . . .	218
A.4 Modelos no-locales A.4 de $^{16}\text{OH}$ en Sgr B2 . . . . .	219
A.5 Modelos no-locales A.5 de $^{16}\text{OH}$ en Sgr B2 . . . . .	220
A.6 Modelos no-locales A.6 de $^{16}\text{OH}$ en Sgr B2 . . . . .	221
A.7 Modelos no-locales A.7 de $^{16}\text{OH}$ en Sgr B2 . . . . .	222
A.8 Modelos no-locales A.8 de $^{16}\text{OH}$ en Sgr B2 . . . . .	223



# Lista de Tablas

1.1	Moléculas detectadas en el espacio hasta 2003 . . . . .	13
1.2	Rango nominal y apertura de los detectores LWS . . . . .	17
3.1	Características promedio del CG y del disco . . . . .	47
3.2	Propiedades físicas promedio de las nubes del CG . . . . .	49
3.3	Posición y tamaños de las condensaciones de Sgr B2 . . . . .	51
3.4	Parámetros derivados de la emisión del continuo milimétrico . . . . .	58
4.1	Líneas detectadas con LWS/FP en Sgr B2(M) entre 181.1–119.6 $\mu\text{m}$ . . . . .	70
4.2	Líneas detectadas con LWS/FP en Sgr B2(M) entre 119.4–51.8 $\mu\text{m}$ . . . . .	71
4.3	Referencias a las líneas detectadas con LWS/FP en Sgr B2(M) . . . . .	72
4.4	Composición comparativa de los mantos de hielo en la galaxia . . . . .	74
5.1	Flujos de las líneas de estructura fina en la región de Sgr B2 . . . . .	117
5.2	Temperaturas del polvo y luminosidades en la región de Sgr B2 . . . . .	119
5.3	Extinciones, densidades electrónicas y temperaturas efectivas de la radiación. . .	122
7.1	Parámetros de los diferentes vientos en la CSE de CRL 2688 . . . . .	164
7.2	Parámetros y densidades de columna de los modelos LVG de CRL 2688 . . . . .	169
7.3	Parámetros de los diferentes vientos en la CSE de CRL 618 . . . . .	172
7.4	Parámetros y densidades de columna de los modelos LVG de CRL 618 (a) . . . .	174
7.5	Parámetros y densidades de columna de los modelos LVG de CRL 618 (b) . . . .	174
7.6	Lista preliminar de moléculas detectadas en el survey de CRL 618 . . . . .	177
7.7	Flujos observados y estimaciones LVG de CO en mm y submm . . . . .	182
7.8	Parámetros de los diferentes vientos en la CSE de NGC 7027 . . . . .	184
7.9	Parámetros y densidades de columna de los modelos LVG de NGC 7027 (a) . . .	185
7.10	Parámetros y densidades de columna de los modelos LVG de NGC 7027 (b) . . .	186
7.11	Abundancias (respecto a $^{12}\text{CO}$ ) de las especies consideradas . . . . .	188

